

THE UNIVERSITY OF NEW SOUTH
WALES

SCHOOL OF ELECTRICAL ENGINEERING AND
COMPUTER SCIENCE AND ENGINEERING

*ETUDE DYNAMIQUE DES
PARTICULES DE SPIN 0 ET
1 DANS LE FORMALISME
DKP*

Boutheïna Boutabia-Chéraïtia

Doctorat en Physique Mathématique

2008

Supervisor:

Assessor:

Contents

INTRODUCTION	i
0.1 Aperçu historique	ii
0.2 Introduction générale	iii
1 PRELIMINAIRES	1
1.1 Notations et conventions	2
1.1.1 Coordonnées	2
1.1.2 Tenseur métrique, indices covariants et contravariants	2
1.2 L'équation de Klein-Gordon	3
1.3 L'équation de Dirac	5
1.3.1 Mer de Dirac. Théorie des trous	7
1.3.2 Difficultés de la théorie des trous	9
1.4 Le paradoxe de Klein	10
1.5 Théorie de la diffusion dans le cas non-relativiste	13
1.5.1 Fonction de Green	14
1.5.2 Matrice de diffusion	16
1.5.3 Formalisme à une dimension	18
1.5.4 Fonction de Green et matrice de diffusion	19
1.5.5 Application au cas de la barrière rectangulaire	21
1.6 Théorie de la diffusion dans le cas relativiste	24
1.6.1 Equation de Feshbach-Villars	25
1.6.2 Matrice de diffusion	29
1.6.3 Formalisme à une dimension	30
1.7 Conditions aux limites pour la particule de Dirac dans la boîte unidimensionnelle	35
1.7.1 Introduction	35
1.7.2 Conditions aux limites	36
2 RESOLUTION DE L'EQUATION DKP DANS LE POTENTIEL SCALAIRE DE WOODS-SAXON	41
2.1 Introduction	42

2.2	Solution de l'équation DKP pour les particules de spin 1	46
2.2.1	Comportement asymptotique	51
2.2.2	Cas de la barrière de potentiel	53
2.2.3	Conditions aux limites	58
2.3	Solution de l'équation DKP pour le spin 0	59
3	<i>DIFFUSION DES PARTICULES DKP PAR LA BARRIERE DE POTENTIEL</i>	63
3.1	Introduction	64
3.2	Fonction de Green pour l'équation DKP	66
3.3	Fonction de Green-DKP et analogie FV , spin 1	71
3.4	Fonction de Green-DKP et analogie FV , spin 0	76
3.5	Matrice de diffusion, spin 1	78
3.6	Matrice de diffusion, spin 0	80
4	<i>CONDITIONS AUX LIMITES POUR LA PARTICULE DKP DANS LA BOITE UNIDIMENSIONNELLE</i>	82
4.1	Introduction	83
4.2	Extension self-adjointe de l'Hamiltonien DKP , Conditions aux limites	84
5	<i>CONCLUSION</i>	93
A	<i>ANNEXES DE MATHEMATIQUES</i>	96
A.1	Définitions	97
A.1.1	Espace de Hilbert	97
A.1.2	Fonction continue et fonction absolument continue	98
A.2	Extension self-adjointe de l'Hamiltonien de Dirac	99
A.3	Résolution d'une équation différentielle de type hypergéométrique	101
B	<i>LEXIQUE</i>	104

Abstract

In this thesis, we are interested in the resolution of the DKP equation for particles of spin 0 and 1, interacting with a scalar potential of Woods-Saxon. We calculate the coefficients of reflection and transmission at the crossing of the barrier. We confirm our results by calculating the Green function, once we have separated out the ST components of the particle, which express the charge symmetry existing in the problem, and we construct the matrix diffusion. In the sequel, we make a mathematical approach of the problem, having the one-dimensional box as a model.

Résumé

Nous nous intéressons à la résolution de l'équation DKP pour les particules de spin 0 et 1 en interaction avec un potentiel scalaire de Woods-Saxon. Nous calculons les coefficients de réflexion et de transmission au passage de la barrière. Nous confirmons nos résultats en calculant la fonction de Green, après avoir séparé les composantes ST de la particule qui expriment la symétrie de charge présente dans le problème, et nous construisons la matrice de diffusion. Pour terminer, nous faisons une approche mathématique du problème, ayant pour modèle la boîte unidimensionnelle.

INTRODUCTION

0.1 Aperçu historique

Au milieu des années 30 [46], le succès de l'équation de Dirac dans la description relativiste des particules de spin $\frac{1}{2}$, motiva certains chercheurs pour tenter de trouver une équation d'onde similaire, du premier ordre, pour décrire les particules de spin 0 qui étaient alors décrites par l'équation relativiste du second ordre de Schrödinger, connue sous le nom d'équation de Klein-Gordon (*KG*). Le premier effort notable dans ce sens revient à Louis de Broglie qui, en tentant de combiner deux leptons afin d'obtenir des photons massifs, basa ses investigations sur des matrices 16×16 , produits de différentes matrices γ de Dirac. En 1936, Pétiau [1], un des étudiants de Louis de Broglie, modifia l'algèbre de ce dernier, en devenant ainsi le premier à obtenir l'algèbre *DKP* (16×16) :

$$\beta^\mu \beta^\nu \beta^\lambda + \beta^\lambda \beta^\nu \beta^\mu = g^{\mu\nu} \beta^\lambda + g^{\nu\lambda} \beta^\mu \quad (1)$$

où $g^{\mu\nu}$ est le tenseur métrique espace-temps de Minkowski, avec la signature $(+ - - -)$.

Par la suite; en 1938, Géhéniau décomposa cette algèbre en trois représentations, la triviale unidimensionnelle, celle de dimension 5 pour le spin 0, et celle de dimension 10 pour le spin 1, et qui vérifient les propriétés suivantes:

$$\begin{aligned} (\beta^\mu)^3 &= g^{\mu\mu} \beta^\mu && \text{pour } \mu = \nu = \lambda \\ \beta^\mu \beta^\nu \beta^\lambda &= 0 && \text{pour } \mu \neq \nu \neq \lambda \\ (\beta^\mu)^2 \beta^\lambda + \beta^\lambda (\beta^\mu)^2 &= g^{\mu\mu} \beta^\lambda && \text{pour } \mu = \nu \neq \lambda \\ \beta^\mu \beta^\nu \beta^\mu &= 0 && \text{pour } \mu = \lambda \neq \nu \\ \mu, \nu, \lambda &= 0, 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (2)$$

Cependant, le travail de Pétiau resta inconnu de beaucoup de chercheurs, notamment de Kemmer qui n'en entendit parler qu'après la seconde guerre mondiale. En fait, parallèlement aux travaux de Pétiau, le physicien Kemmer [2], et le mathématicien Duffin [3], s'intéressèrent aux équations de Proca qui décrivent les particules de spin 1. Kemmer, réalisant que ces équations pouvaient être écrites sous forme d'un ensemble d'équations couplées du premier ordre, les reformula explicitement en matrices 5×5 pour le spin 0, et 10×10 pour le spin 1, sans toutefois, que les règles de commutation (2) soient apportées. Ensuite, Duffin les récrivit sous forme d'une seule équation du premier ordre (1), avec trois parmi les quatre relations de commutation (pas celle de $\lambda = \mu \neq \nu$), et ce n'est qu'en 1939 que Kemmer obtint la quatrième relation. En ces temps-ci, il devenait clair que les composantes primaires de la force nucléaire de basse énergie, étaient dues aux interactions pseudo-scalaires et vectorielles, toutes deux contenues dans le formalisme de Duffin-Kemmer-Pétiau (*DKP*).

Cependant, vers la fin des années 50, l'équation *DKP* fût abandonnée, et les formulations générales retenues pour décrire les particules de spin 0 et spin

1, demeurèrent respectivement, l'équation de KG et l'équation de Proca. Ceci est principalement dû aux investigations détaillées qui apparurent, pour montrer que les formulations de KG et de Proca donnaient les mêmes résultats que la formulation DKP . En effet, dans la représentation de dimension 5 concernant le spin 0, la première composante Ψ_1 de la fonction d'onde est solution de l'équation de KG , et les autres composantes ne sont autres que les dérivées de Ψ_1 . Ces deux équations ont donc donné les mêmes niveaux d'énergie pour le méson π , et les mêmes résultats pour les processus tels que la diffusion $\pi - e$ ($e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-$), et l'équation DKP du spineur à cinq composantes, fût ainsi abandonnée en faveur de celle de KG à une composante, qui quoique du second ordre était plus simple à manier. Par conséquent, certains aspects formels des systèmes DKP , tels que les symétries de la conjugaison de charge (C), de la parité (P), et de l'invariance par renversement du temps (T), ne furent jamais vraiment étudiés [44].

Ce désintérêt pour l'équation DKP dura tant que les chercheurs ne connaissaient que le méson π , et pendant longtemps, personne ne songea à examiner si dans les situations de brisure de symétrie, les quantités physiques demeuraient identiques lorsqu'on les calculait à l'aide de l'équation DKP ou de KG . Pour ainsi dire, l'équivalence entre les systèmes DKP et KG fût prouvée en ayant la masse du méson incident égale à celles des mésons transmis. Lorsque d'autres mésons tel que le méson κ furent découverts, il devenait nécessaire de vérifier si les preuves d'équivalence pouvaient être généralisées lorsqu'il n'y avait plus cette égalité, entre masses initiales et finales, comme dans le cas $\kappa^0 \rightarrow \pi^+e^-\nu^-$. Et les investigations entreprises à partir de 1970, menèrent à la conclusion que les équations de KG et DKP ne pouvaient être en général équivalentes que dans le cas de la symétrie, ce qui renouvela l'intérêt des chercheurs pour cette équation qui fût par la suite, appliquée en chromodynamique quantique (QCD) par Gribov [5], à l'Hamiltonien dynamique covariant par Kanatchikov, et généralisée par Red'kov [7] et Lunardi aux espace-temps curvilignes [4, 8].

0.2 Introduction générale

Les propriétés physiques prévues par la théorie de Schrödinger sont invariantes dans un changement de repère Galiléen, mais elles ne possèdent pas les propriétés d'invariance par rapport au changement de référentiel de Lorentz, qu'exige le principe de la relativité. Rappelons que dans la limite non relativiste, la différence entre l'énergie totale E de la particule et sa masse au repos mc^2 est petite. E' étant l'énergie cinétique, on écrit:

$$E' = E - mc^2, \quad E' \ll mc^2 \quad (3)$$

Comme les transformations de Galilée ne s'identifient aux transformations de Lorentz qu'à la limite des faibles vitesses, la théorie de Schrödinger ne décrit correctement les phénomènes, que dans la mesure où les vitesses des particules

mises en jeu sont négligeables par rapport à celle de la lumière, i.e., $v \ll c$. En particulier, tous les phénomènes concernant l'interaction entre lumière et matière, tels que l'émission, l'absorption ou la diffusion de photons, sortent du cadre de la mécanique quantique non-relativiste.

L'une des principales difficultés d'élaboration de la théorie quantique relativiste vient du fait que la loi de conservation du nombre de particules cesse en général d'être vérifiée. On connaît en effet la propriété d'équivalence entre masse et énergie, une des conséquences importantes du principe de la relativité. Cette propriété se traduit par la possibilité de création ou d'annihilation de particules. Pour être complète, la théorie quantique relativiste doit donc réunir dans un même cadre, des états dynamiques qui diffèrent non seulement par l'état quantique, mais aussi par la nature et le nombre des particules élémentaires qui les composent, et donc faire appel au concept du champ quantifié, d'où le nom adapté de "*théorie quantique des champs*", au lieu de "*théorie quantique relativiste*".

La mécanique quantique relativiste unifie les principes de la relativité à ceux de la mécanique quantique. Dans cette dernière, l'interprétation des énergies négatives se fait par l'introduction d'une mer infinie de particules appelée "mer de Dirac", dans laquelle, la particule physique qu'est le positron se manifeste par une absence de particule [10]. Ce mécanisme, quoique nécessaire pour satisfaire les principes probabilistiques de la mécanique quantique, réalisés dans l'équation de continuité, est sans doute dissymétrique à partir du moment où il traite la particule et l'antiparticule de manières différentes. Cette dissymétrie n'est en fait spécifique qu'aux particules de spins demi-entiers qui obéissent au principe d'exclusion de Pauli. Pour les particules de spins entiers, l'introduction de cette mer de Dirac est inadaptée, et il ne serait possible de parler d'antiparticules que dans le cadre de la théorie quantique des champs. Ainsi donc, pour les particules de spin 0 (tels que les pions et les kaons qui interagissent fortement avec les champs et les autres particules) décrites par l'équation de $KG-0$, l'équation de $FV-0$ rend possible l'introduction des antiparticules via la densité de charge au lieu de la densité de probabilité. On élimine ainsi la mer de Dirac en travaillant sur un espace élargi, pseudo-hilbertien, et dans lequel la représentation particule-antiparticule joue un rôle complètement symétrique. Dans le même ordre d'idées, les particules de spin $1/2$ décrites par l'équation de $KG-1/2$, peuvent être décrites par celle de $FV-1/2$. Remarquons toutefois que les fonctions d'onde solutions de ces deux équations n'apportent pas les mêmes descriptions physiques, notamment au niveau des probabilités de transition.

L'équation DKP , intimement liée à l'équation de FV par la symétrie de charge que toutes deux contiennent; est une extension du formalisme covariant de Dirac au cas des particules scalaires (spin 0) et vectorielles (spin 1). On l'obtient en remplaçant dans l'équation de Dirac, les matrices γ par les matrices β qui vérifient une algèbre plus compliquée (1) appelée "*algèbre DKP*".

Cette thèse se présente comme suit :

- Dans le chapitre "Preliminaires", nous reprenons avec plus ou moins de détails, les notions et les équations auxquelles nous faisons appel pour notre travail de recherche.

- Dans le second chapitre, nous faisons la résolution de l'équation DKP pour les bosons de spin 0 et 1, en interaction avec le potentiel scalaire de Woods-Saxon (WS). Le cas de la barrière de potentiel est déduit comme un cas limite. Nous déduisons les coefficients de réflexion et de transmission, et nous discutons l'effet "*Tunnel de Klein*". Les bonnes conditions aux limites (BCs) pour la barrière sont données.

- Dans le troisième chapitre, et dans le cadre de la barrière de potentiel, nous construisons un Hamiltonien pour les composantes physiques de la particule DKP , et nous calculons la fonction de Green- DKP en termes de celle de Green- KG . Nous déduisons les coefficients de réflexion et de transmission -les mêmes que ceux obtenus dans le second chapitre-, et nous construisons la matrice de diffusion.

- Dans le quatrième chapitre, nous procédons à l'étude mathématique de la particule DKP dans la boîte unidimensionnelle. Nous proposons différentes BCs (Dirichlet, Neumann, et mixtes) aux murs de la boîte, et nous discutons laquelle parmi ces BCs est acceptable physiquement pour constituer une extension self-adjointe de l'Hamiltonien des composantes physiques de la particule DKP .

- Nous clôturons par une conclusion, et nous proposons une partie "Annexes de mathématiques", et une partie "Lexique".

Chapter 1

PRELIMINAIRES

1.1 Notations et conventions

Toutes les expressions figurant dans ce manuscrit seront écrites en considérant

$$\hbar = c = 1 \quad (1.1)$$

Avec ce choix particulier des unités, les temps auront en apparence la dimension d'une longueur, les énergies, les impulsions et les masses celle de l'inverse d'une longueur, et les charges électriques apparaîtront comme des quantités sans dimension.

1.1.1 Coordonnées

Dans l'espace-temps, un point est représenté par le quadrivecteur x^μ tel que:

$$\begin{aligned} x^\mu &= (x^0, x^k) \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3) \\ \mu &= 0, 1, 2, 3, \text{ et } k = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (1.2)$$

avec $x^0 = ct$ la coordonnée du temps, et $x^k = \mathbf{r} = (x, y, z)$.

1.1.2 Tenseur métrique, indices covariants et contravariants

La métrique dans l'espace-temps est une métrique pseudo-euclidienne, définie au moyen du tenseur métrique $g_{\mu\nu}$ de signature $(+ - - -)$:

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

Le quadrivecteur a^μ représente un vecteur contravariant. Le vecteur covariant correspondant a_μ s'en déduit par application du tenseur $g_{\mu\nu}$:

$$a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu \quad (1.4)$$

et vice versa

$$a^\mu = g^{\mu\nu} a_\nu \quad (1.5)$$

avec

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} \quad (1.6)$$

d'où:

$$\begin{cases} a_0 = a^0 \\ a_k = -a^k \end{cases} \quad (1.7)$$

Le produit scalaire de deux quadrivecteurs a_μ et b^μ s'écrit:

$$a_\mu b^\mu = a^\mu b_\mu = a^0 b^0 - \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \quad (1.8)$$

avec $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$, $\mathbf{b} = (b_x, b_y, b_z)$.

La norme du quadrivecteur a^μ s'en déduit par:

$$a_\mu a^\mu = (a^0)^2 - \mathbf{a}^2 \quad (1.9)$$

Le quadrivecteur champ électromagnétique s'écrit:

$$A^\mu = (V, \mathbf{A}) \quad (1.10)$$

avec $V = V(\mathbf{r}, t)$ désignant le potentiel scalaire, et $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ désignant le potentiel vecteur.

L'opérateur gradient s'écrit:

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \nabla \right) \quad (1.11)$$

avec

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (1.12)$$

Le Dalemberdien \square :

$$\square = \partial_\mu \partial^\mu = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \quad (1.13)$$

et

$$D_\mu = \partial_\mu + ieA_\mu = \left(\frac{\partial}{\partial t} + ieV, \nabla - ie\mathbf{A} \right) \quad (1.14)$$

1.2 L'équation de Klein-Gordon

C'est une équation d'onde relativiste, covariante et du second ordre par rapport au temps, qui pour une particule de spin 0 (un méson π par exemple) en interaction avec un champ électromagnétique $A^\mu = (V, \mathbf{A})$, est de la forme:

$$\left[\left(i \frac{\partial}{\partial t} - eV \right)^2 - \left(\frac{1}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right)^2 \right] \Psi = m^2 \Psi \quad (1.15)$$

soit:

$$(D_\mu D^\mu + m^2) \Psi = 0 \quad (1.16)$$

avec $\Psi = \Psi(\mathbf{r}, t)$ la fonction d'onde de la particule.

En l'absence d'interaction, l'équation de *KG* devient:

$$(\square + m^2) \Psi = 0 \quad (1.17)$$

et les états Ψ sont alors des ondes planes qui s'écrivent:

$$\Psi = \exp [i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)] \quad (1.18)$$

avec \mathbf{p} défini par sa projection sur la base des configurations par:

$$\mathbf{p} = \frac{1}{i} \nabla \quad (1.19)$$

et

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2} \quad (1.20)$$

les énergies qui leurs correspondent, pouvant être positives ou négatives, et qui, dans le cas de l'interaction $A^\mu = (V, \mathbf{A})$, deviennent:

$$E = eV \pm \sqrt{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + m^2} \quad (1.21)$$

Les densités, de probabilité de présence P et de courant \mathbf{J} , satisfont l'équation de continuité:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \mathbf{J} = 0 \quad (1.22)$$

soit:

$$\partial_\mu J^\mu = 0 \quad (1.23)$$

avec

$$\begin{aligned} J^\mu &= (P, \mathbf{J}) \\ &= \frac{i}{2m} [\Psi^* (\partial^\mu \Psi) - (\partial^\mu \Psi^*) \Psi] \end{aligned} \quad (1.24)$$

d'où:

$$P(\mathbf{r}, t) = \frac{i}{2m} \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \right] \quad (1.25)$$

et

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2im} [\Psi^* (\nabla \Psi) - (\nabla \Psi^*) \Psi] \quad (1.26)$$

Notons que P n'est pas définie positive. Ceci constitue l'une des difficultés majeures de l'équation de KG , ajoutée à celle qui tient à la possibilité des énergies négatives. Pour tenter de résoudre le problème de ces énergies négatives, Pauli et Weisskopf [10] pensèrent à modifier l'interprétation du quadrivecteur J^μ en désignant par eJ^μ le quadrivecteur densité de courant, et ainsi par $eP(\mathbf{r}, t)$ la densité de charge électrique qui n'avait pas alors de sens physique significatif, car des mésons chargés de spin 0, tels que π^+ et π^- n'étaient pas encore découverts. L'équation de continuité $\partial_\mu J^\mu = 0$ devient ainsi, du point de vue densité et courant, celle de la conservation de la charge plutôt de celle de la conservation des particules, et ainsi, la théorie de KG une théorie de charge et non une théorie à une particule, car il demeure que le nombre de particules n'est toutefois pas conservé, ceci en conséquence de la possibilité d'annihilation et de création de paires de particules de charges opposées, phénomène que seule la théorie des champs interprète de façon satisfaisante. Cette dernière est en fait une théorie décrivant un nombre arbitraire de particules, dans laquelle Ψ est promu du rôle de fonction d'onde à celui d'opérateur capable de créer et d'annihiler des particules. Ce point de vue est traditionnellement appelé "*seconde quantification*"

Dans la théorie de Dirac, on parvient à avoir une densité P définie positive, cependant, la difficulté des énergies négatives y subsiste, et de ce fait la théorie de Dirac ne peut elle non plus être considérée de façon entièrement satisfaisante comme une théorie à une particule.

1.3 L'équation de Dirac

Elaborée par Dirac en 1928, l'équation de Dirac est considérée comme étant la base de la théorie du champ quantifié pour les fermions de spin $\frac{1}{2}$. Cette équation d'onde de type Schrödinger, relativiste et covariante, décrit l'électron dans un champ électromagnétique $A^\mu = (V, \mathbf{A})$, et s'écrit:

$$H_D \Psi = i \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (1.27)$$

soit:

$$\left[\left(i \frac{\partial}{\partial t} - eV \right) - \alpha (-i \nabla - e\mathbf{A}) - \beta m \right] \Psi = 0 \quad (1.28)$$

avec H_D l'Hamiltonien de Dirac défini par:

$$H_D = eV + \alpha (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) + \beta m \quad (1.29)$$

et β et α sont quatre opérateurs qui anti-commutent avec

$$\begin{aligned} (\alpha^k)^2 &= \beta^2 = 1 \\ \alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k &= 0 \quad (k \neq l) \\ \alpha^k \beta + \beta \alpha^k &= 0 \end{aligned} \quad (1.30)$$

En posant $\gamma^\mu = (\gamma^0, \boldsymbol{\gamma})$ avec $\gamma^0 = \beta$ et $\boldsymbol{\gamma} = \beta\boldsymbol{\alpha}$, l'équation de Dirac prend la forme:

$$[i\gamma^\mu D_\mu - m] \Psi = 0 \quad (1.31)$$

les matrices γ^μ vérifiant les propriétés suivantes:

$$\begin{aligned} \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu &= 2g^{\mu\nu} \\ \gamma^{\mu+} &= \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0, \gamma^\mu = \gamma_\mu^+ = \gamma_\mu^{-1} \\ \gamma_\mu &= g_{\mu\nu} \gamma^\nu; \gamma^0 = \gamma_0; \gamma^k = -\gamma_k \end{aligned} \quad (1.32)$$

Avec un choix particulier des β et α

$$\alpha^k = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma_k \\ \sigma_k & \mathbf{0} \end{pmatrix}; \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix} \quad (1.33)$$

l'onde Ψ prend la forme d'une matrice à 4 lignes et 1 colonne:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} \quad (1.34)$$

les σ_k ; $k = 1, 2, 3$ étant les matrices de Pauli, et $\mathbf{1}$ est la matrice unité d'ordre 2.

L'équation de Dirac peut aussi s'écrire dans la forme du second ordre [31], comme suit:

$$[(\gamma^\mu D_\mu)^2 + m^2] \Psi = 0 \quad (1.35)$$

et aussi dans la forme de KG :

$$\left[(D^\mu D_\mu + m^2) \mathbf{1}_4 + \frac{e}{2} \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \right] \Psi = 0 \quad (1.36)$$

appelée équation de KG pour les particules de spin $\frac{1}{2}$, dont le second terme représente l'interaction du spin avec le tenseur électromagnétique $F_{\mu\nu}$, avec $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$, et $\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu]$. Cette équation peut être linéarisée en une équation du premier ordre par rapport au temps, en utilisant la procédure

de linéarisation de FV . Le spineur à quatre composantes Ψ se transformerait alors en un spineur à huit composantes.

En notant par $\bar{\Psi} = \Psi^+ \gamma^0$ l'adjoint de Ψ , on définit le quadrivecteur densité de courant J^μ par

$$J^\mu = \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi \quad (1.37)$$

qui vérifie l'équation de continuité

$$\partial_\mu J^\mu = 0 \quad (1.38)$$

d'où la densité de probabilité de présence P en un point :

$$\begin{aligned} P(\mathbf{r}, t) &= (\Psi^+ \Psi) \\ &= \sum_{i=1}^4 |\Psi_i|^2 \end{aligned} \quad (1.39)$$

et elle est définie positive.

1.3.1 Mer de Dirac. Théorie des trous

De l'équation de Dirac, nous dérivons la relation entre l'énergie totale E , la masse au repos m et la quantité de mouvement \mathbf{p} :

$$E - eV = \pm \sqrt{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + m^2} \quad (1.40)$$

qui devient dans le cas libre:

$$E = \pm \sqrt{m^2 + \mathbf{p}^2} \quad (1.41)$$

prévoyant ainsi l'existence d'états d'énergie négative, compris entre $-\infty$ et $-m$.

Dans la théorie de Dirac, dans ce qu'on appelle le "*vide*", on admet que tous les états d'énergie négative sont occupés par des électrons qui forment la "*mer de Dirac*". Si l'on ajoute un électron à ce "*vide*", il se trouve nécessairement dans un état d'énergie positive, puisque les états d'énergie négative sont tous occupés, et que les électrons obéissent à la statistique de Fermi-Dirac. Le "*vide*" se présente donc comme un gaz de Fermi, de densité infinie, complètement dégénéré, et totalement inobservable. Il ne donne lieu à aucun effet gravitationnel ou électromagnétique. Cette réinterprétation a eu pour seul effet, d'empêcher la production de "radiations catastrophes" qui auraient pu avoir lieu

suite aux transitions radiatives continues, qu'aurait fait un électron réel vers les états d'énergie négative avec émission d'un ou de plusieurs photons, n'était le principe d'exclusion de Pauli qui l'en aurait empêché, et selon lequel chaque état d'énergie négative est occupé par deux électrons, un avec un spin en haut et l'autre avec un spin en bas.

Si les électrons de la "mer de Dirac" ne peuvent manifester leur existence, ils peuvent par contre absorber des radiations. Et si l'un d'eux absorbe un photon d'énergie ω supérieure à $2m$, il s'excite dans un état d'énergie positive, engendrant ce qu'on appelle "un trou". En appliquant la convention concernant les propriétés physiques observables, ce "trou" apparaît comme un positron. Il possède une charge opposée à celle de l'électron manquant, une énergie de signe opposé donc positive, et une impulsion opposée. Dans une telle transition, il s'est formé un réel électron et un positron. C'est le processus de matérialisation de l'énergie ou de la création d'une paire $e^- - e^+$.

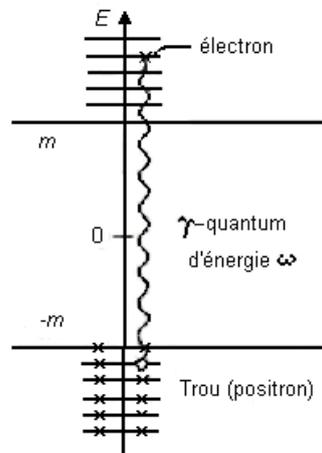


Figure1 [9]. Un photon d'énergie $\omega > 2m$ engendre un trou. Ce trou est interprété comme un positron. Le processus est une création de paire $e^- - e^+$.

De la même façon, à la suite de la production d'un "trou" dans la "mer de Dirac", un électron réel peut émettre un photon en effectuant une transition,

d'un état d'énergie positive vers cet état d'énergie négative inoccupé, ou plutôt occupé par le positron qui sera alors annihilé. C'est le phénomène d'annihilation d'une paire $e^+ - e^-$.

1.3.2 Difficultés de la théorie des trous

La théorie des trous permet de concilier la théorie de Dirac avec les faits expérimentaux: Non-existence des états d'énergie négative, existence des positrons, création et annihilation de paires. Mais il s'agit d'une théorie incomplète. En effet, en postulant l'occupation de la totalité des états d'énergie négative, la théorie cesse d'être une théorie à une particule, même lorsqu'elle ne prétend décrire qu'un seul électron. Le formalisme de Dirac à une particule, tel qu'il a été exposé est donc insuffisant pour décrire une telle situation, et ce n'est que dans le cadre de la théorie des champs que l'on peut espérer en faire une description cohérente.

La théorie des "trous" n'est qu'une première ébauche de la théorie du champ électronique quantifié. Elle a le mérite de fournir des images simples, et peut de ce fait servir de guide dans l'élaboration de la théorie correcte. Mais les défauts et les contradictions apparaissent dès qu'on cherche à en préciser les données. Ainsi, on note les propriétés étranges de ce "*vide*" composé d'un nombre infini d'électrons sans interactions mutuelles.

Un autre défaut de cette théorie est le rôle apparemment très dissymétrique joué par les électrons et les positrons. On peut d'ailleurs leur faire correspondre une théorie de conjugaison de charge, où les positrons jouent le rôle des particules et les électrons celui des trous sans qu'aucune des conséquences physiques ne soit changée. Toutes ces difficultés peuvent être résolues dans le formalisme de la théorie des champs, en partant d'équations invariantes par rapport à l'opérateur de conjugaison de charge. Remarquons que la définition même des états d'énergie négative, dépend du potentiel électromagnétique appliqué. S'agissant d'une particule libre et d'une particule dans un champ coulombien, l'espace des énergies négatives n'est pas le même (Cf. Fig. 2). Dans la définition du "*vide*" donnée plus haut, les états d'énergie négative considérés sont ceux de la particule libre; il est naturel en effet, de définir le "*vide*" en l'absence de champ. L'introduction d'un champ électromagnétique extérieur modifie cet état de "*vide*" (création de paires). Ce milieu se comportant comme un milieu polarisable de sorte qu'une charge électrique dans le "*vide*" paraît plus petite qu'elle n'est réellement. De

tels effets se retrouvent dans la théorie des champs. La théorie des trous permet de les prévoir mais ne fournit aucun moyen cohérent de les calculer.

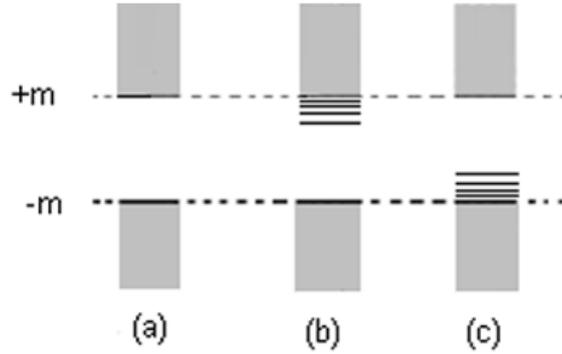


Figure 2 [10]. Spectre d'énergie d'un électron de Dirac.

(a): libre; (b): dans le potentiel attractif $-Ze^2/r$;

(c): dans le potentiel répulsif $+Ze^2/r$.

1.4 Le paradoxe de Klein

L'existence des solutions d'énergie négative de l'équation de Dirac, nous met face à des paradoxes et dilemmes, qui défient toute interprétation dans le cadre de l'équation de Dirac à une seule particule. Un exemple célèbre de ces difficultés est le paradoxe de Klein pour les électrons, et en général pour les fermions, qui peut être expliqué en utilisant la mer de Dirac [9]. Le paradoxe est tel que le coefficient de réflexion par une barrière, pour un faisceau d'électrons ou tout courant, est supérieur à 1.

Le paradoxe de Klein, élaboré à l'origine pour les fermions, a été discuté pour les bosons. En effet, il a été explicitement montré dans [23], en utilisant le formalisme de Kemmer-Duffin-Chandra avec les matrices β de l'algèbre DKP , que pour les bosons de spin 0 et 1, le coefficient de réflexion était inférieur à 1, et par conséquent qu'il n'y avait pas de paradoxe. Cependant, la preuve de l'existence de ce paradoxe ($\mathbf{R} - \mathbf{T} = 1$) a été apportée dans [22] pour les bosons de spin 0 et 1, et dans [31] pour les bosons de spin 0.

Dans le formalisme de Dirac, un puits ou une barrière de potentiel assez forts, peuvent engendrer spontanément une production de particules. Dans ce

contexte, Klein fit en 1928 sa prédiction appelée effet "*Tunnel de Klein*" [11], selon laquelle les électrons peuvent être capables de traverser "*tunneling*" de hautes barrières, sans l'amortissement exponentiel par effet tunnel, prévu dans les processus quantiques. Ceci ne peut être compris qu'en utilisant la création de paires particule-antiparticule. L'effet *Tunnel de Klein* est en fait une propriété des champs quantiques relativistes.

Rappelons que l'effet tunnel est une prévision théorique de la mécanique quantique, stipulant qu'une particule d'énergie E , arrivant sur un mur de potentiel de hauteur V et d'épaisseur L , a une certaine probabilité de le franchir même si $E < V$. Lorsque $2m(V - E)L^2 \gg 1$, cette probabilité vaut [56]:

$$P \simeq 16 \frac{E(V - E)}{V^2} \exp \left[-2L\sqrt{m(V - E)} \right] \quad (1.42)$$

Considérons des électrons d'énergie E , de masse m et de quantité de mouvement k , arrivant sur la barrière définie par (Cf. Fig. 3):

$$V(x) = \begin{cases} V & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (1.43)$$

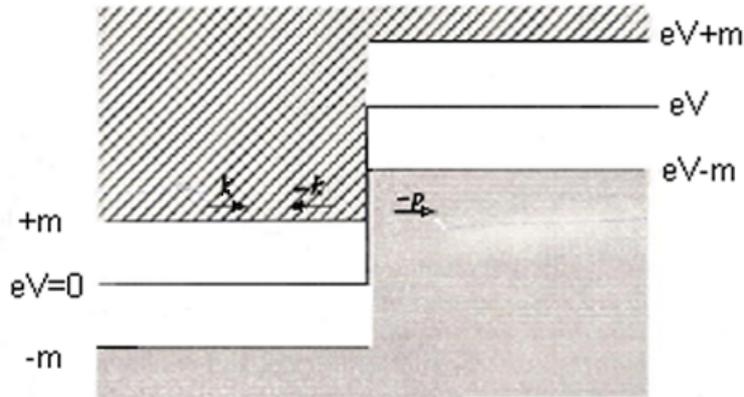


Figure 3 [35]. Les électrons sont montrés avec des flèches pleines; les trous avec des flèches creuses. Le continuum des particules (fond avec rayures) et des trous (fond ombragé) s'imbriquent lorsque $m < E < eV - m$.

Les particules sont incidentes sur $x < 0$ pour $m < E$, et transmises sur $x > 0$ pour $E < eV - m$. Les continums des électrons et des trous s'imbriquent sur

l'"intervalle de Klein" défini par:

$$m < E < eV - m \quad \text{d'où} \quad eV > 2m \quad (1.44)$$

Le calcul des coefficients de réflexion \mathbf{R} et de transmission \mathbf{T} nous donne:

$$\mathbf{R} = \left[\frac{1 - K}{1 + K} \right]^2; \mathbf{T} = \frac{4K}{(1 + K)^2} \quad (1.45)$$

avec K étant le facteur cinématique défini par:

$$K = \frac{p}{k} \frac{(E + m)}{(E + m - eV)} \quad (1.46)$$

et p la quantité de mouvement de la particule transmise.

On voit à partir de (1.45) que pour $E < eV - m$, K est négatif. Ceci, entraîne le résultat paradoxal que $\mathbf{R} > 1$ et $\mathbf{T} < 0$, c'est-à-dire que le nombre de particules réfléchies par la barrière est supérieur à celui des particules incidentes! C'est le " Paradoxe de Klein". Or et selon Pauli, pour $x > 0$ la quantité de mouvement p de la particule transmise est donnée par:

$$p^2 = (eV - E)^2 - m^2 \quad (1.47)$$

et comme celle-ci se meut de la gauche vers la droite, la vitesse de groupe v_g définie par:

$$v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{(E - eV)} \quad (1.48)$$

est positive ($v_g > 0$), et donc p doit être négative ($p < 0$), soit:

$$p = -\sqrt{(eV - E)^2 - m^2} \quad (1.49)$$

et ainsi, \mathbf{R} et \mathbf{T} devraient être tous deux positifs vérifiant $\mathbf{R} + \mathbf{T} = 1$ et non pas $\mathbf{R} > 1$ et $\mathbf{T} < 0$!

Plusieurs tentatives furent menées pour expliquer ce paradoxe. Selon Nikishov [12], et Hansen et Ravendal [13], lorsque $R \neq 1$; alors T mesure les positrons émis par la barrière, car sinon, le principe d'exclusion de Pauli aurait entraîné l'interférence destructive entre l'électron émis et celui réfléchi par la barrière. Mais lorsqu'il n'y a pas de production de particules, alors $R = 1$ et $T = 0$.

Un autre exemple d'illustration de l'effet *Tunnel de Klein* est celui de la barrière carrée définie par:

$$V(x) = \begin{cases} V & \text{pour } |x| \leq a \\ 0 & \text{pour } |x| > a \end{cases} \quad (1.50)$$

et pour laquelle, les coefficients de réflexion et de transmission sont donnés par:

$$\mathbf{R} = \frac{(1 - K^2)^2 \sin^2(2pa)}{4K^2 + (1 - K^2) \sin^2(2pa)} \quad (1.51)$$

$$\mathbf{T} = \frac{4K^2}{4K^2 + (1 - K^2) \sin^2(2pa)} \quad (1.52)$$

Le *Tunnel de Klein* est mis en relief pour:

$$2pa = N\pi \quad (1.53)$$

d'où $\mathbf{R} = 0$ et $\mathbf{T} = 1$. Et comme $(E - eV) < 0$, ceci correspond à l'énergie:

$$E_N = eV - \sqrt{m^2 + N^2\pi^2/4a^2} \quad (1.54)$$

L'électron traverse la barrière sans réflexion. C'est la transmission de résonance.

1.5 Théorie de la diffusion dans le cas non-relativiste

La section efficace est une grandeur physique observable, qui intervient dans l'expression de divers phénomènes résultant de l'interaction des particules avec une cible. Sa détermination permet de modéliser la nature de l'interaction. Théoriquement, la section efficace peut se calculer de différentes manières. La plus moderne est celle des fonctions de Green, dont les propagateurs qui, dans leur forme asymptotique deviennent des matrices de diffusion permettant la déduction immédiate de la section efficace.

Lorsqu'un faisceau de particules formant un paquet d'ondes, est envoyé sur une cible, il entre en interaction avec celle-ci au moyen d'un potentiel diffuseur. L'interaction se traduit par la déviation du faisceau incident de sa direction initiale de propagation, et la section efficace exprime la probabilité que le paquet d'ondes incident soit diffusé dans un certain angle solide.

Le faisceau est supposé être libre dans un temps très antérieur à l'interaction avec la cible, son impulsion est supposée être bien déterminée, et son évolution est décrite par l'équation de Schrödinger

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle \quad (1.55)$$

où $|\Psi(t)\rangle$ est le vecteur d'état du système, et H l'opérateur Hamiltonien:

$$H = H_0 + V; H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (1.56)$$

Pour la particule libre, la solution de (1.55) s'écrit dans la représentation position:

$$\langle \mathbf{r} | \varphi_{\mathbf{p}}(t) \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp [i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)] \quad (1.57)$$

avec $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$, et $|\varphi_{\mathbf{p}}(t)\rangle$ étant les états stationnaires vérifiant les relations de fermeture et d'orthonormalisation suivantes:

$$\int d^3\mathbf{p} |\varphi_{\mathbf{p}}(t)\rangle \langle \varphi_{\mathbf{p}}(t)| = 1 \quad (1.58)$$

$$\langle \varphi_{\mathbf{p}} | \varphi_{\mathbf{p}'} \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (1.59)$$

où $|\varphi_{\mathbf{p}}\rangle$ représente la partie indépendante du temps de l'état stationnaire.

1.5.1 Fonction de Green

Il n'y a pas que l'équation de Schrödinger pour décrire l'évolution d'un système. Une telle description peut aussi être envisagée à l'aide de la fonction de l'espace et du temps, représentative d'un opérateur appelé propagateur. On obtient cette fonction en mathématisant un peu plus la description des phénomènes de collision, soit, par la recherche de la fonction de Green pour l'équation de Schrödinger:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H \right) G(t, t') = \delta(t - t') \quad (1.60)$$

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) G_0(t, t') = \delta(t - t') \quad (1.61)$$

avec $G(t, t')$ et $G_0(t, t')$ respectivement, les fonctions de Green avec et sans interaction. Elles nous permettent d'exprimer l'état du système à un instant t en fonction de son état à l'instant $t' < t$. On écrit:

$$|\Psi(t)\rangle = G(t, t') |\Psi(t')\rangle \quad (1.62)$$

$$|\varphi(t)\rangle = G_0(t, t') |\varphi(t')\rangle \quad (1.63)$$

avec

$$G(t, t') = G_0(t, t') = 0 \text{ si } t < t' \quad (1.64)$$

Pour les Hamiltoniens indépendants du temps nous écrivons:

$$\begin{aligned} G(t, t') &= G(t - t') \\ G_0(t, t') &= G_0(t - t') \end{aligned} \quad (1.65)$$

Nous introduisons la transformée de Fourier:

$$\langle \mathbf{r} | G_0(t - t') | \mathbf{r}' \rangle = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3 \mathbf{p} dE \exp [i\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - iE(t - t')] G_0(\mathbf{p}, E) \quad (1.66)$$

et comme nous avons (Cf. 1.61) :

$$G_0(\mathbf{p}, E) = \frac{1}{E - \frac{\mathbf{p}^2}{2m}} \quad (1.67)$$

en remplaçant dans (1.66), et en faisant l'intégration sur E avec utilisation du théorème des résidus, nous obtenons:

$$\begin{aligned} &\langle \mathbf{r} | G_0(t - t') | \mathbf{r}' \rangle \\ &= G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = -i\theta(t - t') \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 \mathbf{p} \exp \left[i\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - i\frac{\mathbf{p}^2}{2m}(t - t') \right] \end{aligned} \quad (1.68)$$

soit:

$$G_0(t - t') = -i\theta(t - t') \int d^3 \mathbf{p} |\varphi_{\mathbf{p}}(t)\rangle \langle \varphi_{\mathbf{p}}(t')| \quad (1.69)$$

avec θ la fonction d'Heaviside définie par:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases} \quad (1.70)$$

Finalement on écrit:

$$G(t, t') = G_0(t, t') + \int_{-\infty}^{+\infty} dt'' G_0(t, t'') V(t'') G(t'', t') \quad (1.71)$$

$$G(t, t') = G_0(t, t') + \int_{-\infty}^{+\infty} dt'' G(t, t'') V(t'') G_0(t'', t') \quad (1.72)$$

Les deux équations ci-dessus sont les équations intégrales de Lippmann-Schwinger, auxquelles correspondent les solutions intégrales suivantes:

$$|\Psi(t)\rangle = |\varphi(t)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dt' G_0(t, t') V(t') |\Psi(t')\rangle \quad (1.73)$$

$$|\Psi(t)\rangle = |\varphi(t)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dt' G(t, t') V(t') |\varphi(t')\rangle \quad (1.74)$$

1.5.2 Matrice de diffusion

L'état du système à un instant quelconque est décrit par $|\Psi_{\mathbf{p}}(t)\rangle$. Son état initial (i) est décrit par $|\varphi_{\mathbf{p}_i}(t)\rangle$, le paquet d'onde étant supposé libre dans un temps très antérieur à l'interaction avec la cible ($t \rightarrow -\infty$). Le problème fondamental de la diffusion, est de déterminer la probabilité de trouver ce système dans l'état libre final (f), i.e., $|\varphi_{\mathbf{p}_f}(t)\rangle$ à un instant futur se situant à l'infini ($t \rightarrow +\infty$). L'amplitude de cette probabilité définit ce qu'on appelle l'élément de matrice de diffusion $S_{\mathbf{p}_f, \mathbf{p}_i}(t)$ et s'écrit:

$$S_{\mathbf{p}_f, \mathbf{p}_i}(t) = \lim_{t \rightarrow +\infty} \langle \varphi_{\mathbf{p}_f}(t) | \Psi_{\mathbf{p}_i}(t) \rangle \quad (1.75)$$

En substituant (1.69) dans (1.73), et en prenant la limite, nous obtenons :

$$|\Psi(t)\rangle = |\varphi(t)\rangle - i \int d^3\mathbf{p} |\varphi_{\mathbf{p}}(t)\rangle \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \langle \varphi_{\mathbf{p}}(t') | V(t') |\Psi(t')\rangle \quad (1.76)$$

d'où:

$$|\Psi_{\mathbf{p}_i}(t)\rangle = |\varphi_{\mathbf{p}_i}(t)\rangle - i \int d^3\mathbf{p} |\varphi_{\mathbf{p}}(t)\rangle \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \langle \varphi_{\mathbf{p}}(t') | V(t') |\Psi_{\mathbf{p}_i}(t')\rangle \quad (1.77)$$

soit, en projetant sur $|\varphi_{\mathbf{p}_f}(t)\rangle$:

$$S_{\mathbf{p}_f, \mathbf{p}_i}(t) = \delta(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i) - i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \varphi_{\mathbf{p}_f}(t) | V(t) |\Psi_{\mathbf{p}_i}(t)\rangle \quad (1.78)$$

et en substituant $|\Psi_{\mathbf{p}_i}(t)\rangle$ par (1.74):

$$S_{\mathbf{p}_f, \mathbf{p}_i}(t) = \delta(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i) - i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \langle \varphi_{\mathbf{p}_f}(t) | V(t) \delta(t - t') + V(t) G(t - t') V(t') |\varphi_{\mathbf{p}_i}(t')\rangle \quad (1.79)$$

Lorsque V ne dépend pas du temps, l'énergie du système se conserve, et on peut alors remplacer les états et les fonctions de Green intervenant dans le calcul, par leurs noyaux de Fourier qui dépendent de l'énergie. On écrit:

$$\begin{aligned} G_0(E) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\tau E} G_0(\tau) \\ G(E) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\tau E} G(\tau) \end{aligned} \quad (1.80)$$

et

$$\begin{aligned} |\varphi_{\mathbf{p}}(E)\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{iEt} |\varphi_{\mathbf{p}}(t)\rangle \\ |\Psi_{\mathbf{p}}(E)\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{iEt} |\Psi_{\mathbf{p}}(t)\rangle \end{aligned} \quad (1.81)$$

En insérant (1.80) dans (1.71) et (1.72), on obtient:

$$\begin{aligned} G(E) &= G_0(E) + G_0(E) V G(E) \\ G(E) &= G_0(E) + G(E) V G_0(E) \end{aligned} \quad (1.82)$$

et en insérant (1.81) dans (1.73) et (1.74), on obtient:

$$\begin{aligned} |\Psi_{\mathbf{p}}(E)\rangle &= |\varphi_{\mathbf{p}}(E)\rangle + G_0(E) V |\Psi_{\mathbf{p}}(E)\rangle \\ |\Psi_{\mathbf{p}}(E)\rangle &= |\varphi_{\mathbf{p}}(E)\rangle + G(E) V |\varphi_{\mathbf{p}}(E)\rangle \end{aligned} \quad (1.83)$$

En substituant dans (1.79), $|\varphi_{\mathbf{p}}\rangle$ par $|\varphi_{\mathbf{p}}\rangle e^{-iEt}$, et en sachant que:

$$\delta(E_f - E_i) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E_f - E_i)t} dt \quad (1.84)$$

l'élément de matrice de diffusion devient :

$$S_{\mathbf{p}_f, \mathbf{p}_i} = \delta(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i) - 2\pi i \delta(E_f - E_i) T_{f,i}(E) \quad (1.85)$$

avec $T_{f,i}(E)$ l'élément de matrice de l'opérateur de transition T , se définissant par:

$$T_{f,i}(E) = \langle \varphi_{\mathbf{p}_f} | V + V G(E) V | \varphi_{\mathbf{p}_i} \rangle = \langle \varphi_{\mathbf{p}_f} | V | \Psi_{\mathbf{p}_i} \rangle \quad \text{avec } E = E_f = E_i \quad (1.86)$$

1.5.3 Formalisme à une dimension

La matrice de diffusion trouve son interprétation physique lorsqu'on la relie aux coefficients de réflexion et de transmission. Les cas réalistes dans l'étude des problèmes de diffusion sont en général à trois dimensions, le cas à une dimension s'insère dans le cadre du modèle ou de l'approximation représentant cette réalité.

Considérons une particule de masse m dans un potentiel unidimensionnel $V(x)$ [15], qu'on suppose réel, symétrique et indépendant du temps. On assume que lorsque $|x| \rightarrow \infty$, $V(x) \rightarrow 0$, la particule devenant ainsi libre. L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\left[-\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (1.87)$$

Les formes asymptotiques des fonctions d'onde $\Psi_+(x)$ (arrivant de $-\infty$) et $\Psi_-(x)$ (arrivant de $+\infty$) s'écrivent:

$$\Psi_{\pm}(x) = \begin{cases} e^{\pm ikx} + R_{\pm}(k) e^{\mp ikx} & x \rightarrow -\infty \text{ pour } (+) \text{ et } x \rightarrow +\infty \text{ pour } (-) \\ T_{\pm}(k) e^{\pm ikx} & x \rightarrow +\infty \text{ pour } (+) \text{ et } x \rightarrow -\infty \text{ pour } (-) \end{cases} \quad (1.88)$$

et peuvent se mettre sous la forme:

$$\Psi_{\pm}(x) = \begin{cases} Ae^{\pm ikx} + B'e^{\mp ikx} & x \rightarrow -\infty \text{ pour } (+) \text{ et } x \rightarrow +\infty \text{ pour } (-) \\ A'e^{\pm ikx} + Be^{\mp ikx} & x \rightarrow +\infty \text{ pour } (+) \text{ et } x \rightarrow -\infty \text{ pour } (-) \end{cases} \quad (1.89)$$

avec $k = (2mE)^{1/2}$, et les coefficients de transmission $|T_{\pm}(k)|^2$ et de réflexion $|R_{\pm}(k)|^2$ vérifiant:

$$|T_{\pm}(k)|^2 + |R_{\pm}(k)|^2 = 1 \quad (1.90)$$

Les parties entrantes (*incoming* : *in*) et sortantes (*outgoing* : *out*) de $\Psi_{\pm}(x)$ s'écrivent:

$$\begin{cases} \Psi_{in}^{\pm}(x) = A\theta(-x) e^{\pm ikx} + B\theta(x) e^{\mp ikx} \\ \Psi_{out}^{\pm}(x) = A'\theta(x) e^{\pm ikx} + B'\theta(-x) e^{\mp ikx} \end{cases} \quad (1.91)$$

La matrice de diffusion S , relie $\Psi_{in}^{\pm}(x)$ à $\Psi_{out}^{\pm}(x)$ par:

$$\begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{aa} & S_{ab} \\ S_{ba} & S_{bb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (1.92)$$

Lorsque $V \rightarrow 0$, $A' \rightarrow A$, $B' \rightarrow B$ et S devient matrice unité. Lorsqu'on considère les deux cas particuliers $(A, B) = (1, 0)$ et $(A, B) = (0, 1)$, on obtient:

$$\begin{pmatrix} S_{aa} & S_{ab} \\ S_{ba} & S_{bb} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_+ & R_- \\ R_+ & T_- \end{pmatrix} \quad (1.93)$$

L'unitarité de S s'écrit:

$$S^+ S = \begin{pmatrix} S_{aa} & S_{ba} \\ S_{ab} & S_{bb} \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} S_{aa} & S_{ab} \\ S_{ba} & S_{bb} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.94)$$

d'où :

$$\begin{cases} |S_{aa}|^2 + |S_{ba}|^2 = 1 \\ S_{aa}^* S_{ab} + S_{ba}^* S_{bb} = 0 \\ |S_{aa}| = |S_{bb}| \\ |S_{ab}| = |S_{ba}| \end{cases} \quad (1.95)$$

ce qui équivaut à:

$$\begin{cases} |T_{\pm}|^2 + |R_{\pm}|^2 = 1 \\ T_+^* R_- + R_+^* T_- = 0 \\ |T_+| = |T_-| \\ |R_+| = |R_-| \end{cases} \quad (1.96)$$

Comme V est réel, $\Psi^*(x)$ satisfait aussi l'équation (1.87) et s'obtient à partir de $\Psi(x)$ en substituant dans (1.89), A par B'^* et B par A'^* . Ceci conduit à:

$$T_+ = T_- \quad (1.97)$$

De même, V étant symétrique, $\Psi(-x)$ satisfait l'équation (1.87), et s'obtient à partir de $\Psi(x)$ en substituant dans (1.89), A par B et A' par B' . On obtient:

$$R_+ = R_- \quad (1.98)$$

ce qui réduit à deux le nombre des paramètres indépendants de S , d'où:

$$S = \begin{pmatrix} T & R \\ R & T \end{pmatrix} \quad (1.99)$$

1.5.4 Fonction de Green et matrice de diffusion

La fonction de Green dépendante de l'énergie et associée à l'équation de Schrödinger, s'écrit dans le cas unidimensionnel [17] sous la forme standard suivante:

$$\begin{aligned} G(x_f, x_i; E) &= G^{(b.s.)}(x_f, x_i; E) + G^{(s.s.)}(x_f, x_i; E) \\ &= \sum_n \frac{\Psi_n(x_f) \Psi_n^*(x_i)}{E - E_n} + \int_0^{+\infty} dk \frac{\Psi_k^+(x_f) \Psi_k^{+*}(x_i) + \Psi_k^-(x_f) \Psi_k^{-*}(x_i)}{E - E_k} \end{aligned} \quad (1.100)$$

où $\Psi_n(x)$ et $\Psi_k^{\pm}(x)$ sont les états liés (*bound state: bs*) et de diffusion (*scattering state: ss*) de l'équation de Schrödinger, avec respectivement les énergies E_n et E_k .

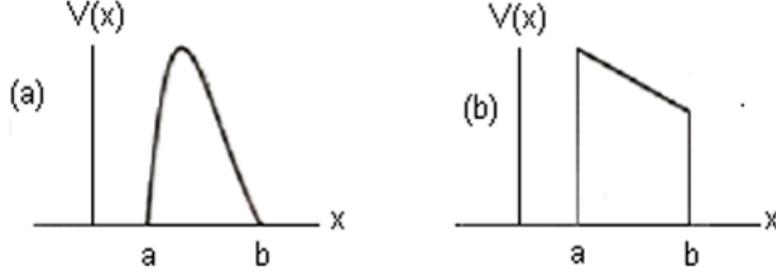


Figure 4 [17]. (a): barrière symétrique continue; (b): barrière trapézoïdale

Pour des potentiels comme ceux de la figure 4, les états de diffusion $\Psi_k^{(\pm)}(x)$ sont des ondes planes arrivant de $-\infty$ et $+\infty$, et qui s'écrivent [14] :

$$\Psi_k^{(\pm)}(x) = \frac{1}{\mathcal{N}} \begin{cases} e^{\pm ikx} + R_{\pm}(k) e^{\mp ikx} & \begin{cases} x \ll a \text{ pour } (+) \\ x \gg b \text{ pour } (-) \end{cases} \\ T_{\pm}(k) e^{\pm ikx} = T(k) e^{\pm ikx} & \begin{cases} x \gg b \text{ pour } (+) \\ x \ll a \text{ pour } (-) \end{cases} \end{cases} \quad (1.101)$$

avec \mathcal{N} étant une constante de normalisation indépendante de V , qu'on obtient à partir de la relation de normalisation $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_{k'}^{(\pm)}(x) \Psi_k^{(\pm)*}(x) = \delta(k' - k)$, d'où: $\mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. On assume qu'il n'y a pas d'états liés pour V , donc $G^{(b.s.)} = 0$ dans (1.100).

En considérant les possibilités:

$$\begin{aligned} (--) & \text{ pour } x_i, x_f < a \\ (-+) & \text{ pour } x_i < a \text{ et } x_f > b \\ (+-) & \text{ pour } x_i > b \text{ et } x_f < a \\ (++) & \text{ pour } x_i, x_f > b \end{aligned} \quad (1.102)$$

et en utilisant les propriétés suivantes:

$$\begin{aligned} |R|^2 + |T|^2 &= 1 \\ R_{(\pm)}^*(k) &= R_{(\pm)}(-k) \\ T^*(k) &= T(-k) \\ R_{(\pm)}^*(k) T(k) + R_{(\mp)}(k) T^*(k) &= 0 \end{aligned} \quad (1.103)$$

on obtient ($p^2 = 2mE$) :

$$\begin{aligned}
& G_{\mp\mp}(x_f, x_i; p) \\
&= \frac{m}{\pi} \int_0^{+\infty} dk \frac{1}{p^2 - k^2} \left[e^{ik(x_f - x_i)} + e^{-ik(x_f - x_i)} \right. \\
&\quad \left. + R_{(\pm)}(k) e^{\mp ik(x_f + x_i)} + R_{(\pm)}^*(k) e^{\pm ik(x_f + x_i)} \right] \\
&= \frac{m}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{1}{p^2 - k^2} \left[e^{ik(x_f - x_i)} + R_{(\pm)}(k) e^{\mp ik(x_f + x_i)} \right]
\end{aligned} \tag{1.104}$$

et

$$\begin{aligned}
& G_{\substack{-+ \\ +-}}(x_f, x_i; p) \\
&= \frac{m}{\pi} \int_0^{+\infty} dk \frac{1}{p^2 - k^2} \left[T(k) e^{\pm ik(x_f - x_i)} + T^*(k) e^{\mp ik(x_f - x_i)} \right. \\
&\quad \left. + (R_{(\pm)}^*(k) T(k) + R_{(\mp)}(k) T^*(k)) e^{\pm ik(x_f + x_i)} \right] \\
&= \frac{m}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{1}{p^2 - k^2} T(k) e^{ik|x_f - x_i|}
\end{aligned} \tag{1.105}$$

Le calcul des intégrales ci-dessus se fait en utilisant le théorème des résidus. Pour celle en $e^{ik(x_f - x_i)}$ dans (1.104), on considère un contour le long de l'axe des réels, fermé par un demi-cercle infini dans la moitié supérieure du plan complexe (si $(x_f - x_i) > 0$) ou dans la moitié inférieure (si $(x_f - x_i) < 0$), et pour celle en $R_{(\pm)}(k) e^{\mp ik(x_f + x_i)}$, on prend un contour le long de l'axe des réels fermé par un demi-cercle dans le demi-plan complexe supérieur. Dans (1.105), on considère un contour dans le demi-plan complexe supérieur. On obtient:

$$\begin{aligned}
G_{\mp\mp}(x_f, x_i; p) &= \frac{m}{ip} \left[e^{ip|x_f - x_i|} + R_{(\pm)}(p) e^{\mp ip(x_f + x_i)} \right] \\
G_{\substack{-+ \\ +-}}(x_f, x_i; p) &= \frac{m}{ip} T(p) e^{ip|x_f - x_i|}
\end{aligned} \tag{1.106}$$

1.5.5 Application au cas de la barrière rectangulaire

Considérons un potentiel d'un intérêt très particulier en physique nucléaire; celui de Woods-Saxon (WS):

$$V(x) = \frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{|x| - a}{r}\right)} \tag{1.107}$$

Ce potentiel décrit l'interaction d'un neutron avec un noyau lourd, laquelle interaction est utilisée dans le modèle en couches. V_0 est positif, le paramètre a représente le rayon nucléaire, et r la couche surfacique.

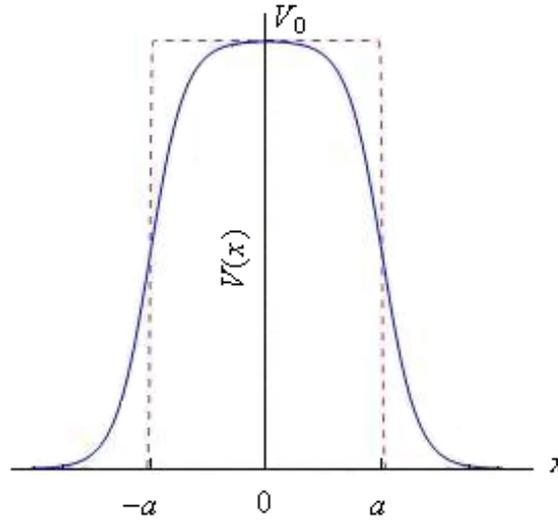


Figure 5 : Potentiel scalaire unidimensionnel de Woods-saxon.
avec $a = 2$, $r = \frac{1}{3}$ pour la courbe en traits pleins,
et $a = 2$, $r = \frac{1}{100}$ pour la courbe en traits pointillés.

La barrière rectangulaire est obtenue lorsque $r \rightarrow 0^+$

$$V(x) \rightarrow V_0 \theta(a - |x|) \quad (1.108)$$

et en faisant le changement de variables [14] :

$$x' = \frac{x + a}{2a} \quad (1.109)$$

elle prend la forme suivante:

$$V(x') = V_0 \theta(x') \theta(1 - x') \quad (1.110)$$

Ainsi, l'étude d'une particule de masse m dans le champ (1.108) sur l'intervalle $[-a, a]$, devient équivalente à celle d'une particule de masse $4ma^2$ dans le champ (1.110) sur l'intervalle $[0, 1]$, avec $a = \frac{1}{2}$. Par la suite, la fonction de Green qui vérifie l'équation de Lippmann-Schwinger (Cf. 1.82) :

$$G(E, x_f, x_i) = G_0(E, x_f, x_i) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx G_0(E, x_f, x) V(x) G(E, x, x_i) \quad (1.111)$$

s'écrit [18] :

$$G(E, x_f, x_i) = G_0(E, x_f, x_i) + V_0 \int_0^1 dx G_0(E, x_f, x) G(E, x, x_i) \quad (1.112)$$

soit:

$$G(E, x_f, x_i) = \Delta(x_f, x_i) G_0(E, x_f, x_i) + e^{ip[|x_f|+|x_i|-C(x_f)-C(x_i)]} \left[G(E, C(x_f), C(x_i)) + \frac{im}{\sqrt{2mE}} \Delta(x_f, x_i) \right] \quad (1.113)$$

avec

$$C(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 1 \\ x & \text{si } 0 \leq x \leq 1 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases} \quad (1.114)$$

$$\Delta(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{si } (x, y) \in]-\infty, 0[\cup]1, +\infty[\\ 0 & \text{si } (x, y) \in [0, 1] \end{cases} \quad (1.115)$$

et $G_0(E, x_f, x_i)$ est la fonction de Green libre définie par:

$$G_0(E, x_f, x_i) = \frac{-im}{p} e^{ip|x_f-x_i|}, \quad p = \sqrt{2mE} \quad (1.116)$$

En considérant la limite $x_i, x_f \rightarrow +\infty$, et les limites $x_i \rightarrow -\infty$ et $x_f \rightarrow +\infty$, nous obtenons:

$$\begin{aligned} G_{++}(E; x_f, x_i) &= \frac{m}{ip} \left\{ e^{ip|x_f-x_i|} + e^{ip(x_f+x_i)} \left[e^{-ip \frac{i(\alpha-p) \sin \chi}{\chi \cos \chi - i\alpha \sin \chi}} \right] \right\} \\ G_{+-}(E; x_f, x_i) &= \frac{m}{ip} e^{ip|x_f-x_i|} \left[e^{-ip \frac{\chi}{\chi \cos \chi - i\alpha \sin \chi}} \right] \end{aligned} \quad (1.117)$$

avec

$$\begin{aligned} \chi &= \sqrt{2m(E - V_0)} \\ \alpha &= \sqrt{2mE} - \frac{mV_0}{\sqrt{2mE}} \end{aligned} \quad (1.118)$$

En comparant (1.117) avec (1.106), nous tirons R et T :

$$\begin{aligned} R &= e^{-ip} \frac{i(\alpha - p) \sin \chi}{\chi \cos \chi - i\alpha \sin \chi} \\ T &= e^{-ip} \frac{\chi}{\chi \cos \chi - i\alpha \sin \chi} \end{aligned} \quad (1.119)$$

d'où les coefficients de réflexion et de transmission:

$$\begin{aligned}\mathbf{R} &= |R|^2 = \frac{V_0^2 \sin^2 \sqrt{2m(E - V_0)}}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 \sqrt{2m(E - V_0)}} \\ \mathbf{T} &= |T|^2 = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 \sqrt{2m(E - V_0)}}\end{aligned}\quad (1.120)$$

qui vérifient

$$\mathbf{R} + \mathbf{T} = 1 \quad (1.121)$$

1.6 Théorie de la diffusion dans le cas relativiste

Construire une théorie relativiste à une particule, et sans ambiguïté est difficile. En effet, à des vitesses proches de la vitesse de la lumière, la création et l'annihilation de paires de particules sont inhérentes à la théorie. Rappelons que pour les particules de spin demi-entier, qui obéissent au principe d'exclusion de Pauli, l'introduction de la mer de Dirac pour l'interprétation des énergies négatives nécessite un nombre infini de particules, laquelle mer n'est pas adaptée aux particules de spin 0 que décrit l'équation de KG , et dont la difficulté majeure réside en la présence de la dérivée seconde par rapport au temps. Pour tenir compte physiquement des énergies négatives, on est amenés de la théorie quantique relativiste à la théorie quantique des champs qui, par le biais de l'équation de FV , conçoit les antiparticules pour les particules de spin 0, en échangeant le principe de la densité de probabilité contre celui de la densité de charge [19]. La procédure de FV consiste en fait, en la réduction de la dérivée seconde par rapport au temps, en utilisant une fonction d'onde vectorielle à la place de la fonction d'onde scalaire. L'espace est dans ce cas élargi et est pseudo-hilbertien, la symétrie de charge requise par les principes relativistes exhibée, et la représentation particule-antiparticule y joue un rôle complètement symétrique. Dans cet ordre d'idées, une particule de spin 1/2 décrite par l'équation de $KG-1/2$, pourrait être décrite par l'équation de $FV-1/2$ [16], sur un espace plus élargi, dans lequel disparaît la mer de Dirac en laissant place à une totale symétrisation particule-antiparticule.

1.6.1 Equation de Feshbach-Villars

Dans le but de réhabiliter l'équation de KG dans son rôle d'équation d'onde à une particule, Feshbach et Villars ont élaboré leur théorie connue sous le nom de théorie à deux composantes. Leur procédure étant basée sur une extension des composantes de la fonction d'onde.

Pour des particules chargées, de spin 0 et 1/2, en interaction avec un champ électromagnétique $A^\mu = (V, \mathbf{A})$, l'équation de KG s'écrit de manière unifiée [16, 31] comme suit:

$$\left[\left[\left(\frac{\partial}{\partial t} + ieV \right)^2 - (\nabla - ie\mathbf{A})^2 + m^2 \right] I_{2^{2s}(2s+1)} + se(\sigma F)^{(2s)} \right] \Phi_s(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (1.122)$$

où $\Phi_s(\mathbf{r}, t)$ possède $2^{2s}(2s+1)$ composantes, et I_d est la matrice unité de dimension d . F étant le tenseur électromagnétique défini par $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$, et $(\sigma F) = \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu}$ avec $\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu]$. Pour toute matrice M , nous adoptons les notations suivantes:

$$(M)^{(2s)} = \begin{cases} 1 & \text{pour } s = 0 \\ M & \text{pour } s = 1/2 \end{cases} \quad (1.123)$$

L'état dynamique du système à un instant donné est représenté par l'ensemble des deux fonctions Φ_s et $\frac{\partial}{\partial t}\Phi_s$, ou encore par les deux combinaisons:

$$\begin{pmatrix} \varphi_s \\ \chi_s \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \Phi_s(\mathbf{r}, t) + \frac{i}{m} \left(\frac{\partial}{\partial t} + ieV \right) \Phi_s(\mathbf{r}, t) \\ \Phi_s(\mathbf{r}, t) - \frac{i}{m} \left(\frac{\partial}{\partial t} + ieV \right) \Phi_s(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \quad (1.124)$$

qui représentent la linéarisation de la dérivée seconde par rapport au temps, d'où l'équation type-Schrödinger de FV :

$$i \frac{\partial \Psi_s(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H_s \Psi_s(\mathbf{r}, t) \quad s = 0, 1/2 \quad (1.125)$$

avec

$$\Psi_s(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \varphi_s \\ \chi_s \end{pmatrix} \quad (1.126)$$

et H_s l'Hamiltonien de FV défini par:

$$\begin{aligned} H_s &= (\tau_3 + i\tau_2) \otimes \frac{1}{2m} \left[-(\nabla - ie\mathbf{A})^2 I_{2^{2s+1}(2s+1)} + se(\sigma F)^{(2s)} \right] \\ &\quad + m(\tau_3 \otimes I_{2^{2s+1}(2s+1)}) + eV I_{2^{2s+1}(2s+1)} \end{aligned} \quad (1.127)$$

Le symbole \otimes est le symbole de Kronecker, produit tensoriel de matrices, et τ_1, τ_2, τ_3 sont les matrices de Pauli:

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.128)$$

L'équation de continuité s'écrit:

$$\partial_\mu J^\mu = 0 \text{ avec } J^\mu = (\rho, \mathbf{J}) \quad (1.129)$$

d'où la densité de charge:

$$\rho = \overline{\Psi}_s(\mathbf{r}, t) \Psi_s(\mathbf{r}, t) \quad (1.130)$$

avec

$$\overline{\Psi}_s(\mathbf{r}, t) = \Psi_s^+(\mathbf{r}, t) \left(\tau_3 \otimes (\gamma^0)^{(2s)} \right) \quad (1.131)$$

et la densité de courant associé:

$$\begin{aligned} \mathbf{J} = & \frac{1}{2im} \left[\overline{\Psi}_s(\mathbf{r}, t) \left((\tau_3 + i\tau_2) \otimes I_{2^{2s+1}(2s+1)} \right) \nabla \Psi_s(\mathbf{r}, t) \right. \\ & \left. - \nabla \overline{\Psi}_s(\mathbf{r}, t) \left((\tau_3 + i\tau_2) \otimes I_{2^{2s+1}(2s+1)} \right) \Psi_s(\mathbf{r}, t) \right] \\ & - \frac{e}{m} \mathbf{A} \overline{\Psi}_s(\mathbf{r}, t) \left((\tau_3 + i\tau_2) \otimes I_{2^{2s+1}(2s+1)} \right) \Psi_s(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (1.132)$$

Dans le cas du spin 0, les relations ci-dessus deviennent

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H_{FV} \Psi \quad (1.133)$$

avec

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \Phi + \frac{i}{m} \left(\frac{\partial}{\partial t} + ieV \right) \Phi \\ \Phi - \frac{i}{m} \left(\frac{\partial}{\partial t} + ieV \right) \Phi \end{pmatrix} \quad (1.134)$$

et

$$H_{FV} = -\frac{(\tau_3 + i\tau_2)}{2m} (\nabla - ie\mathbf{A})^2 + m\tau_3 + eV \quad (1.135)$$

qui n'est pas hermitien. La pseudo-hermiticité via laquelle il devient pseudo-hermitien- est définie par:

$$\overline{H_{FV}} = H_{FV} \quad (1.136)$$

avec

$$\overline{H_{FV}} = \tau_3 H_{FV}^+ \tau_3 \quad (1.137)$$

où H_{FV}^+ est l'adjoint de H_{FV} .

La valeur moyenne d'un opérateur Ω est définie par [39] :

$$\langle \Omega \rangle = \langle \Psi | \tau_3 \Omega | \Psi \rangle = \int \Psi^+ \tau_3 \Omega \Psi d^3 \mathbf{r} \quad (1.138)$$

Le spineur adjoint par:

$$\bar{\Psi} = \Psi^+ \tau_3 \quad (1.139)$$

Et la norme par:

$$\langle \Psi | \tau_3 | \Psi \rangle = \pm 1 \quad (1.140)$$

et elle donc positive ou négative, d'où le fait que l'espace solution de l'équation de FV n'est pas hilbertien mais pseudo-hilbertien. Plus précisément, les solutions de (1.133) qui ont la norme positive, décrivent les états des particules d'énergie positive, et celles qui ont la norme négative, décrivent les états des antiparticules d'énergie négative.

La densité de charge et la densité de courant s'écrivent:

$$\rho = \Psi^+ \tau_3 \Psi = |\varphi|^2 - |\chi|^2 \quad (1.141)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{J} = & \frac{1}{2im} \left[\Psi^+ \tau_3 (\tau_3 + i\tau_2) \nabla \Psi - (\nabla \Psi^+ \tau_3) (\tau_3 + i\tau_2) \Psi \right] \\ & - \frac{e}{m} \mathbf{A} \Psi^+ \tau_3 (\tau_3 + i\tau_2) \Psi \end{aligned} \quad (1.142)$$

La densité de charge ρ apparaît comme la différence de deux densités de charge définies positives, et peut être à son tour positive ou négative. Plus précisément, elle serait une densité de charge d'une particule ou d'une antiparticule, selon que l'énergie est positive ou négative. Par conséquent, il est aisé de voir qu'à travers la transformation de conjugaison de charge:

$$\Psi \rightarrow \Psi_c = \tau_1 \Psi^* \quad (1.143)$$

et ρ et \mathbf{J} se modifient comme suit:

$$\begin{aligned} \rho & \rightarrow \rho_c = -\rho \\ \mathbf{J} & \rightarrow \mathbf{J}_c = \mathbf{J} \end{aligned} \quad (1.144)$$

Ainsi, si par exemple Ψ décrit le méson π^- , Ψ_c décrit son antiparticule le méson π^+ . Et si $\Psi = \Psi_c$, on est alors dans le cas de la description de la particule neutre, le méson π^0 par exemple.

En l'absence d'interaction ($A^\mu = 0$), les états libres solutions de l'équation (1.133) s'écrivent :

$$\varphi_{\mathbf{p}}^\sigma(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \varphi_{\mathbf{p}}(t) \rangle = \frac{e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)}}{(2\pi)^{3/2}} U_{\mathbf{p}}^\sigma, \quad \sigma = \pm 1 \quad (1.145)$$

avec $E = \sigma E_{\mathbf{p}}$ et $E_{\mathbf{p}} = (\mathbf{p}^2 + m^2)^{1/2}$. $\sigma = +1$ correspond aux particules, et $\sigma = -1$ aux antiparticules. $U_{\mathbf{p}}^\sigma$ est appelé vecteur isocharge et est défini par [14]:

$$U_{\mathbf{p}}^\sigma = \frac{1}{2(mE_{\mathbf{p}})^{1/2}} \begin{pmatrix} m + \sigma E_{\mathbf{p}} \\ m - \sigma E_{\mathbf{p}} \end{pmatrix} \quad (1.146)$$

On définit par:

$$\overline{U_{\mathbf{p}}^\sigma} = U_{\mathbf{p}}^{\sigma+} \tau_3 \quad (1.147)$$

et on vérifie que:

$$\overline{U_{\mathbf{p}}^\sigma} U_{\mathbf{p}}^{\sigma'} = \sigma \delta_{\sigma\sigma'} \quad (1.148)$$

$$U_{\mathbf{p}}^\sigma \overline{U_{\mathbf{p}}^\sigma} = \frac{\sigma E_{\mathbf{p}} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} (\tau_3 + i\tau_2) + m\tau_3}{2E_{\mathbf{p}}} \quad (1.149)$$

$$\sum_{\sigma} U_{\mathbf{p}}^\sigma \sigma \overline{U_{\mathbf{p}}^\sigma} = 1 \quad (1.150)$$

d'où les relations d'orthonormalisation et de fermeture :

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\mathbf{p}}^\sigma | \tau_3 | \varphi_{\mathbf{p}'}^{\sigma'} \rangle &= \sigma \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \\ \sum_{\sigma} \int d^3\mathbf{p} |\varphi_{\mathbf{p}}^\sigma(t)\rangle \sigma \langle \varphi_{\mathbf{p}}^\sigma(t) | \tau_3 &= 1 \end{aligned} \quad (1.151)$$

Lorsque l'interaction est scalaire, unidimensionnelle et indépendante du temps, les solutions stationnaires sont de la forme $\Psi(x, t) = e^{-iEt} \Psi(x)$, et l'équation (1.133) est équivalente aux équations couplées suivantes [31] :

$$\begin{aligned} E\varphi &= -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} (\varphi + \chi) + m\varphi + eV(x)\varphi \\ E\chi &= +\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} (\varphi + \chi) - m\chi + eV(x)\chi \end{aligned} \quad (1.152)$$

d'où:

$$\begin{aligned} \varphi_d(x) &= \frac{E - eV(x)}{m} \varphi_s(x) \\ O_{KG} \varphi_s(x) &= 0 \end{aligned} \quad (1.153)$$

avec

$$\begin{aligned} \varphi_s &= (\varphi + \chi) \\ \varphi_d &= (\varphi - \chi) \end{aligned} \quad (1.154)$$

1.6.2 Matrice de diffusion

Le formalisme des intégrales de chemin est parmi les outils puissants utilisés en mécanique quantique non relativiste (*MQNR*), pour l'obtention d'une expression analytique des fonctions de Green [51]. Cette approche a été étendue à la mécanique quantique relativiste (*QMR*) en utilisant un paramètre d'évolution invariant, comme le temps propre de Schwinger [52], mais cette astuce est une faille dans la procédure, car le paramètre d'évolution n'est pas effectivement un temps d'évolution physique. Cependant, avec l'équation de *FV*, la situation est différente, car c'est le temps physique qui est utilisé comme paramètre d'évolution, et la propagation a sa signification type-Schrödinger [40]. Dans ce qui suit, nous considérons le cas d'une particule de spin 0 dans un potentiel scalaire, l'équation de *FV* s'écrivant:

$$H_{FV} = H_0 + eV, \quad \text{avec } H_0 = -\frac{(\tau_3 + i\tau_2)}{2m} \nabla^2 + m\tau_3 \quad (1.155)$$

et en suivant les mêmes étapes que dans le cas non-relativiste, on calcule les propagateurs libre G_0 , et avec interaction G . Nous écrivons [14] :

$$G_0(\mathbf{p}, E) = \frac{E + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} (\tau_3 + i\tau_2) + m\tau_3}{E^2 - (\mathbf{p}^2 + m^2)} \quad (1.156)$$

et

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{r} | G_0(t - t') | \mathbf{r}' \rangle \\ &= -i\theta(t - t') \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \exp[i\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - iE(t - t')] \frac{E_{\mathbf{p}} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} (\tau_3 + i\tau_2) + m\tau_3}{2E_{\mathbf{p}}} \\ & - i\theta(t' - t) \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \exp[i\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + iE(t - t')] \frac{-E_{\mathbf{p}} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} (\tau_3 + i\tau_2) + m\tau_3}{2E_{\mathbf{p}}} \end{aligned} \quad (1.157)$$

d'où:

$$\begin{aligned} & G_0(t - t') \\ &= -i\theta(t - t') \int d^3\mathbf{p} |\varphi_{\mathbf{p}}^1(t)\rangle \langle \varphi_{\mathbf{p}}^1(t')| \tau_3 - i\theta(t' - t) \int d^3\mathbf{p} |\varphi_{\mathbf{p}}^{-1}(t)\rangle \langle \varphi_{\mathbf{p}}^{-1}(t')| \tau_3 \end{aligned} \quad (1.158)$$

et on aboutit aux mêmes relations que (1.71), (1.72), (1.73), et (1.74). En remplaçant (1.158) dans (1.73), et en prenant les limites $t \rightarrow \pm\infty$, nous obtenons:

$$|\Psi(t)\rangle_{t \rightarrow \pm\infty} = |\varphi(t)\rangle - i \int d^3\mathbf{p} |\varphi_{\mathbf{p}}^{\pm 1}(t)\rangle \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \langle \varphi_{\mathbf{p}}^{\pm 1}(t') | \tau_3 V(t') | \Psi(t') \rangle \quad (1.159)$$

L'élément de matrice de diffusion S est donné par:

$$S_{\mathbf{p}_f\sigma,\mathbf{p}_i\sigma'} = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \left\langle \varphi_{\mathbf{p}_f}^\sigma(t) \left| \tau_3 \right| \Psi_{\mathbf{p}_i}^{\sigma'}(t) \right\rangle \quad (1.160)$$

d'où:

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{p}_f\sigma,\mathbf{p}_i\sigma'} &= \left\langle \varphi_{\mathbf{p}_f}^\sigma(t) \left| \tau_3 \right| \varphi_{\mathbf{p}_i}^{\sigma'}(t) \right\rangle \\ &- i \int d^3\mathbf{p} \left\langle \varphi_{\mathbf{p}_f}^\sigma(t) \left| \tau_3 \right| \varphi_{\mathbf{p}}^{\pm 1}(t) \right\rangle \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \left\langle \varphi_{\mathbf{p}}^{\pm 1}(t') \left| \tau_3 V(t') \right| \Psi_{\mathbf{p}_i}^{\sigma'}(t') \right\rangle \\ &= \sigma \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i) - i\sigma \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \varphi_{\mathbf{p}_f}^\sigma(t) \left| \tau_3 V(t) \right| \Psi_{\mathbf{p}_i}^{\sigma'}(t) \right\rangle \end{aligned} \quad (1.161)$$

soit

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{p}_f\sigma,\mathbf{p}_i\sigma'} &= \sigma \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i) \\ &- i\sigma \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \left\langle \varphi_{\mathbf{p}_f}^\sigma(t) \left| \tau_3 [V(t) \delta(t-t') + V(t) G(t-t') V(t')] \right| \varphi_{\mathbf{p}_i}^{\sigma'}(t') \right\rangle \end{aligned} \quad (1.162)$$

Cette expression définit les amplitudes des processus suivants [14] :

Processus	$\sigma(f)$	$\sigma'(i)$
Diffusion des particules	+1	+1
Diffusion des antiparticules	-1	-1
Création d'une paire particule-antiparticule	+1	-1
Annihilation d'une paire particule-antiparticule	-1	+1

Lorsque l'interaction est indépendante du temps, l'élément de matrice de diffusion s'écrit:

$$S_{\mathbf{p}_f\sigma,\mathbf{p}_i\sigma'} = \sigma \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i) - 2\pi i \sigma \delta(\sigma E_f - \sigma' E_i) \left\langle \varphi_{\mathbf{p}_f}^\sigma \left| \tau_3 T(E) \right| \varphi_{\mathbf{p}_i}^{\sigma'} \right\rangle \quad (1.163)$$

et comme $E_f = E_i$ (les états, initial et final de la particule sont libres), donc pour $\sigma \neq \sigma'$ aucun processus physique n'est réalisé. Notamment sont exclus ceux de la création et de l'annihilation des particules.

1.6.3 Formalisme à une dimension

On considère une particule de masse m dans un potentiel à une dimension $V(x)$, réel, pair, et indépendant du temps, qui s'annule lorsque $|x| \rightarrow \infty$. L'équation de FV pour le cas stationnaire s'écrit:

$$\left(-\frac{(\tau_3 + i\tau_2)}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + m\tau_3 + eV(x) \right) \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (1.164)$$

En suivant la même procédure que dans le cas non relativiste, nous écrivons les formes asymptotiques des fonctions d'onde $\Psi_{\sigma(\pm)}(x)$ (+ : arrivant de $-\infty$, et - : arrivant de $+\infty$):

$$\Psi_{\sigma(\pm)}(x) = \begin{cases} e^{\pm i\sigma kx} U_k^\sigma + R_{\sigma(\pm)}(k) e^{\mp i\sigma kx} U_k^\sigma & \begin{cases} x \rightarrow -\infty \text{ pour } (+) \\ x \rightarrow +\infty \text{ pour } (-) \end{cases} \\ T_{\sigma(\pm)}(k) e^{\pm i\sigma kx} U_k^\sigma & \begin{cases} x \rightarrow +\infty \text{ pour } (+) \\ x \rightarrow -\infty \text{ pour } (-) \end{cases} \end{cases} \quad (1.165)$$

soit:

$$\Psi_{\sigma(\pm)}(x) = \begin{cases} A_\sigma e^{\pm i\sigma kx} + B'_\sigma e^{\mp i\sigma kx} & \begin{cases} x \rightarrow -\infty \text{ pour } (+) \\ x \rightarrow +\infty \text{ pour } (-) \end{cases} \\ A'_\sigma e^{\pm i\sigma kx} + B_\sigma e^{\mp i\sigma kx} & \begin{cases} x \rightarrow +\infty \text{ pour } (+) \\ x \rightarrow -\infty \text{ pour } (-) \end{cases} \end{cases} \quad (1.166)$$

avec

$$|T_\pm(k)|^2 + |R_\pm(k)|^2 = 1 \quad (1.167)$$

et $A_\sigma, A'_\sigma, B_\sigma, B'_\sigma$ sont des vecteurs de dimension 2×1 , $\sigma = \pm 1$, et U_k^σ est donné par (1.146).

Les parties entrantes (*inc*) et sortantes (*out*) de $\Psi_{\sigma(\pm)}(x)$ dans les régions asymptotiques s'écrivent:

$$\begin{cases} \Psi_{\sigma(\pm)}^{in}(x) = A_\sigma \theta(-x) e^{\pm i\sigma kx} + B_\sigma \theta(x) e^{\mp i\sigma kx} \\ \Psi_{\sigma(\pm)}^{out}(x) = A'_\sigma \theta(x) e^{\pm i\sigma kx} + B'_\sigma \theta(-x) e^{\mp i\sigma kx} \end{cases} \quad (1.168)$$

La matrice S relie l'onde sortante $\Psi_{\sigma(\pm)}^{out}(x)$ à l'onde entrante $\Psi_{\sigma(\pm)}^{in}(x)$ par:

$$\begin{pmatrix} A'_\sigma \\ B'_\sigma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{aa} & S_{ab} \\ S_{ba} & S_{bb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_\sigma \\ B_\sigma \end{pmatrix} \quad (1.169)$$

où $S_{aa}, S_{ab}, S_{ba}, S_{bb}$ sont des blocs de matrices 2×2 , d'où:

$$S = \begin{pmatrix} S_{aa} & S_{ab} \\ S_{ba} & S_{bb} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_+ & 0 & R_- & 0 \\ 0 & T_+ & 0 & R_- \\ R_+ & 0 & T_- & 0 \\ 0 & R_+ & 0 & T_- \end{pmatrix} \quad (1.170)$$

La conservation de charge de l'équation de FV , nous conduit à la condition de pseudo-unitarité de S [16] qui s'écrit:

$$\bar{S}S = (I_2 \otimes \tau_3) S^+ (I_2 \otimes \tau_3) S = I_4 \quad (1.171)$$

d'où:

$$\begin{aligned} |T_{\pm}(k)|^2 + |R_{\pm}(k)|^2 &= 1 \\ T_+^* R_- + R_+^* T_- &= 0 \\ |T_+| &= |T_-|, |R_+| = |R_-| \end{aligned} \quad (1.172)$$

Le potentiel $V(x)$ étant réel, $\Psi_{\sigma(\pm)}^*(x)$ est solution de (1.164), d'où:

$$T_+ = T_- \quad (1.173)$$

De même, $V(x) = V(-x)$, alors $\Psi_{\sigma(\pm)}(-x)$ est solution de (1.164), d'où:

$$R_+ = R_- \quad (1.174)$$

et S s'écrit finalement:

$$S = \begin{pmatrix} T & R \\ R & T \end{pmatrix} \otimes I_2 \quad (1.175)$$

La fonction de Green associée à l'équation type-Schrödinger de FV s'écrit:

$$\begin{aligned} G(x_f, x_i; E) &= G^{(b.s.)}(x_f, x_i; E) + G^{(s.s.)}(x_f, x_i; E) \\ &= \sum_n \frac{\Psi_n(x_f) \Psi_n^*(x_i)}{E - E_n} + \sum_{\sigma} \sigma \int_0^{+\infty} dk \frac{\Psi_k^{\sigma}(x_f) \overline{\Psi_k^{\sigma}(x_i)}}{E - \sigma E_k} \end{aligned} \quad (1.176)$$

où $\Psi_n(x)$ et $\Psi_k(x)$ sont les solutions stationnaires de l'équation de FV pour les états liés et de diffusion, avec respectivement, les énergies respectives $\pm E_n$ et $\pm\sqrt{m^2 + k^2}$.

Pour des potentiels comme ceux de la figure 4, on assume qu'il n'y a pas d'états liés pour $V(x)$, donc $G^{(b.s.)} = 0$. Les états de diffusion $\Psi_k^{\sigma(\pm)}(x)$ sont des ondes planes arrivant de $-\infty$ et $+\infty$, et qui s'écrivent [14] :

$$\Psi_k^{\sigma(\pm)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} e^{\pm i\sigma kx} U_k^{\sigma} + R_{\sigma(\pm)}(k) e^{\mp i\sigma kx} U_k^{\sigma} & \begin{cases} x \ll a \text{ pour } (+) \\ x \gg b \text{ pour } (-) \end{cases} \\ T_{\sigma(\pm)}(k) e^{\pm i\sigma kx} U_k^{\sigma}; T_{\sigma(\pm)}(k) = T(k) & \begin{cases} x \gg b \text{ pour } (+) \\ x \ll a \text{ pour } (-) \end{cases} \end{cases} \quad (1.177)$$

En considérant les possibilités (1.102), et en utilisant les propriétés (1.103), et les intégrales suivantes:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left[e^{ik(x_f - x_i)} + R_{(\pm)}(k) e^{\mp ik(x_f + x_i)} \right] &= \delta(x_f - x_i) \\ \int_{-\infty}^{+\infty} dk T(k) e^{\pm ik(x_f - x_i)} &= 0 \end{aligned} \quad (1.178)$$

nous obtenons:

$$G_{\mp\mp}(x_f, x_i; p) = -\frac{i}{2m} (\tau_3 + i\tau_2) \delta(x_f - x_i) + \tau(x_f, x_i, E, E) \frac{1}{2\sqrt{E^2 - m^2}} \left(e^{ip|x_f - x_i|} + R_{(\pm)}(p) e^{\mp ip(x_f + x_i)} \right) \quad (1.179)$$

et

$$G_{\pm\pm}(x_f, x_i; p) = \tau(x_f, x_i, E, E) \frac{1}{2\sqrt{E^2 - m^2}} T(p) e^{\pm ip|x_f - x_i|} \quad (1.180)$$

avec $p = \sqrt{E^2 - m^2}$, et $\tau(x_f, x_i, E, E)$ donné par :

$$\tau(x_f, x_i, E, E) = E + \frac{E^2}{2m} (\tau_3 + i\tau_2) + \frac{m}{2} (\tau_3 - i\tau_2) \quad (1.181)$$

La fonction de Green- FV dépendante de l'énergie, se définit aussi comme suit:

$$G_{FV}(E) = \frac{1}{E - H_{FV}} \quad (1.182)$$

Sachant que:

$$\begin{cases} \tau_1^2 = \tau_2^2 = \tau_3^2 = 1 \\ \tau_2\tau_3 = -\tau_3\tau_2 \\ (\tau_3 + i\tau_2)^2 = 0 \end{cases} \quad (1.183)$$

et en utilisant les propriétés suivantes:

$$\begin{cases} -\frac{1}{2m} \nabla^2 = \frac{(E - eV)^2 - m^2 - O_{KG}}{2m} \\ [eV, -\frac{1}{2m} \nabla^2] = [eV, -\frac{1}{2m} O_{KG}] \end{cases} \quad (1.184)$$

où O_{KG} est l'opérateur de KG défini par:

$$O_{KG} = (E - eV)^2 - (m^2 - \nabla^2) \quad (1.185)$$

nous obtenons:

$$G_{FV}(E) = -\frac{1}{2m} (\tau_3 + i\tau_2) + \left[E + \frac{(E - eV)^2 - m^2}{2m} (\tau_3 + i\tau_2) + m\tau_3 - eV \right] O_{KG}^{-1} - \frac{1}{2m} (E + m\tau_3 - eV) O_{KG}^{-1} eV (\tau_3 + i\tau_2) + \frac{1}{2m} (E + m\tau_3 - eV) eV O_{KG}^{-1} (\tau_3 + i\tau_2) \quad (1.186)$$

qui s'écrit dans la base des configurations à une dimension $|x\rangle$, sous la forme:

$$\begin{aligned} G_{FV}(x_f, x_i, E) &= \langle x_f | G_{FV} | x_i \rangle \\ &= -iG_{KG}(E, x_f, x_i) \tau(E, x_f, x_i) - \frac{1}{2m} (\tau_3 + i\tau_2) \delta(x_f - x_i) \end{aligned} \quad (1.187)$$

avec

$$\begin{aligned} &\tau(E, x_f, x_i) \\ &= \frac{1}{2m} [E^2 - eV(x_f) + e^2V(x_f)V(x_i)] (\tau_3 + i\tau_2) \\ &+ \frac{1}{2} [E - eV(x_f)] (1 - \tau_1) \\ &+ \frac{1}{2} [E - eV(x_i)] B (1 + \tau_1) + \frac{m}{2} (\tau_3 - i\tau_2) \end{aligned} \quad (1.188)$$

et $G_{KG}(E, x_f, x_i)$ [14, 18] est la fonction de Green- KG définie par:

$$\begin{aligned} &G_{KG}(E, x_f, x_i) \\ &= \langle x_f | O_{KG}^{-1} | x_i \rangle = \Delta(x_f, x_i) G_{KG}^0(E, x_f, x_i) \\ &+ e^{ip[|x_f|+|x_i|-C(x_f)-C(x_i)]} \left[G_{KG}(E, C(x_f), C(x_i)) - \frac{1}{b} \Delta(x_f, x_i) \right] \end{aligned} \quad (1.189)$$

et lorsque $(x_f, x_i) \in [0, 1]$:

$$G_{KG}(E, x_f, x_i) = A [\theta(x_i - x_f) h(x_i) h(1 - x_f) + \theta(x_f - x_i) h(x_f) h(1 - x_i)] \quad (1.190)$$

avec

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2p\rho} \frac{1}{\rho \cos \rho - i\beta \sin \rho}; h(x) = \rho \cos \rho x - ip \sin \rho x \\ \rho &= \sqrt{(E - eV_0)^2 - m^2} \\ \beta &= p + \frac{e^2V_0^2 - 2eV_0E}{2p} = \frac{[(E - eV_0)^2 - m^2] + (E^2 - m^2)}{2\sqrt{E^2 - m^2}} \end{aligned} \quad (1.191)$$

La fonction $G_{KG}^0(E, x_f, x_i)$ est la fonction de Green- KG libre:

$$G_{KG}^0(E, x_f, x_i) = \frac{1}{b} e^{ip|x_f - x_i|}, \quad b = 2p \quad (1.192)$$

et $C(x)$ et $\Delta(x_f, x_i)$ sont donnés par (1.114) et (1.115).

En considérant les limites $x_f, x_i \rightarrow \pm\infty$ (même signe pour x_f et x_i), nous obtenons:

$$G_{DKP}^{\bar{+}\bar{+}}(E, x_f, x_i) = -\frac{1}{2m} (\tau_3 + i\tau_2) \delta(x_f - x_i) + \tau(x_f, x_i, E, E) \frac{1}{2i\sqrt{E^2 - m^2}} \left[e^{ip|x_f - x_i|} + e^{-ip} \frac{i(\beta - p) \sin \rho}{\rho \cos \rho - i\beta \sin \rho} e^{+ip(x_f + x_i)} \right] \quad (1.193)$$

et lorsque $x_f \rightarrow \pm\infty$ et $x_i \rightarrow \mp\infty$:

$$G_{DKP}^{\mp\pm}(E, x_f, x_i) = \tau(x_f, x_i, E, E) \left[\frac{1}{2i\sqrt{E^2 - m^2}} e^{-ip} \frac{\rho}{\rho \cos \rho - i\beta \sin \rho} e^{+ip|x_f - x_i|} \right] \quad (1.194)$$

En comparant (1.193) avec (1.179) et (1.194) avec (1.180), nous obtenons les coefficients de réflexion $\mathbf{R} = |R|^2$, et de transmission $\mathbf{T} = |T|^2$, avec:

$$R = e^{-ip} \frac{i(\beta - p) \sin \rho}{\rho \cos \rho - i\beta \sin \rho} \quad (1.195)$$

$$T = e^{-ip} \frac{\rho}{\rho \cos \rho - i\beta \sin \rho} \quad (1.196)$$

qui vérifient $\mathbf{R} + \mathbf{T} = 1$. Ces coefficients sont aussi ceux de KG , du fait que l'équation de FV en découle.

1.7 Conditions aux limites pour la particule de Dirac dans la boîte unidimensionnelle

1.7.1 Introduction

Selon les principes de la mécanique quantique, on définit pour chaque système quantique un espace de Hilbert \mathcal{H} , dans lequel, chaque quantité mesurable (énergie, moment angulaire,...) -appelée "observable"- doit être représentée par un opérateur self-adjoint agissant sur \mathcal{H} . De signification particulière, l'Hamiltonien H qui est une observable très spéciale, car elle génère le temps d'évolution des états, et son spectre représente l'énergie du système.

Dans le cas de la particule de Dirac, l'état du système est un quadrivecteur normalisé $\Psi \in \mathcal{H}$. Le temps d'évolution des états Ψ est déterminé par la famille des opérateurs unitaires : $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$, $U^+(t)U(t) = U(t)U^+(t) = Id$, opérateur identité, par conséquent, H est self-adjoint.

La particule libre dans un repère unidimensionnel ($V(x) = 0$), est l'exemple canonique le plus simple de la mécanique quantique non-relativiste ($MQNR$).

Cependant, ce n'est plus si simple lorsque la particule libre est dans une boîte unidimensionnelle, et ceci, à cause des subtilités mathématiques qui apparaissent avec les conditions aux limites (*BCs* : Boundary conditions), l'hermiticité, et les domaines de définition des opérateurs impliqués. La *BC* la plus simple avec laquelle l'Hamiltonien libre de Schrödinger est un opérateur self-adjoint bien défini, étant celle de Dirichlet ($\psi = 0$).

Les *BCs* utilisées en *MQNR* ne peuvent être extrapolées au cas relativiste (*MQR*), sans prouver au préalable que l'Hamiltonien est self-adjoint pour elles. Une condition nécessaire pour avoir la particule relativiste confinée dans la boîte unidimensionnelle $[0, L]$, est que la densité du courant s'annule aux murs:

$j(0) = j(L) = 0$, appelée aussi condition d'imperméabilité. Et pour que la particule soit "libre" dans la boîte, il faut que la densité du courant satisfasse aux murs la condition: $j(0) = j(L) \neq 0$, et on dira alors que les murs sont transparents à la particule [47].

1.7.2 Conditions aux limites

L'électron libre à l'intérieur de la boîte unidimensionnelle définie par:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x \in \Omega = [0, L] \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (1.197)$$

est décrit par l'équation de Dirac:

$$H_D \Psi = \left(-i\alpha_x \frac{d}{dx} + \beta m \right) \Psi = E \Psi \quad (1.198)$$

Le spineur Ψ de Dirac peut être mis sous la forme:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (1.199)$$

avec $\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}$ et $\chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$, appelés respectivement grand et petit demi-spineurs, d'où:

$$-i\sigma_x \frac{d\chi}{dx} + m\phi = E\phi \quad (1.200)$$

$$-i\sigma_x \frac{d\phi}{dx} - m\chi = E\chi \quad (1.201)$$

ou encore:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + p^2\right)\phi_i = 0; \quad i = 1, 2 \quad (1.202)$$

avec $p = \sqrt{E^2 - m^2}$. χ s'écrit en fonction de ϕ comme suit:

$$\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \frac{-i}{m + E} \begin{pmatrix} 0 & \frac{d}{dx} \\ \frac{d}{dx} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} \quad (1.203)$$

On prend $\phi_2 = 0$ (donc $\chi_1 = 0$), et on écrit la solution générale de l'équation différentielle (1.202) d'ordre 2 en ϕ_1 :

$$\phi_1 = A_1 e^{ipx} + B_1 e^{-ipx} \equiv A_1 \phi_1^{(1)} + B_1 \phi_1^{(2)} \quad (1.204)$$

d'où:

$$\chi_2 = \frac{p}{E + m} (A_1 e^{ipx} - B_1 e^{-ipx}) \quad (1.205)$$

avec A_1 et B_1 constantes complexes, et $\phi_1^{(1)}$ et $\phi_1^{(2)}$ les solutions particulières et indépendantes, i.e., vérifiant la condition:

$$\begin{vmatrix} \phi_1^{(1)} & \phi_1^{(2)} \\ \phi_1^{(1)'} & \phi_1^{(2)'} \end{vmatrix} = \phi_1^{(1)} \frac{d\phi_1^{(2)}}{dx} - \phi_1^{(2)} \frac{d\phi_1^{(1)}}{dx} \neq 0 \quad (1.206)$$

En choisissant la BC : $\Psi(0) = 0$, càd $\phi(0) = \begin{pmatrix} \phi_1(0) \\ 0 \end{pmatrix} = 0$ et

$\chi(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_2(0) \end{pmatrix}$, on obtient le système homogène suivant:

$$\begin{cases} A_1 \phi_1^{(1)} \Big|_{x=0} + B_1 \phi_1^{(2)} \Big|_{x=0} = 0 \\ A_1 \frac{d\phi_1^{(1)}}{dx} \Big|_{x=0} + B_1 \frac{d\phi_1^{(2)}}{dx} \Big|_{x=0} = 0 \end{cases} \quad (1.207)$$

dont le déterminant $\phi_1^{(1)} \Big|_{x=0} \frac{d\phi_1^{(2)}}{dx} \Big|_{x=0} - \phi_1^{(2)} \Big|_{x=0} \frac{d\phi_1^{(1)}}{dx} \Big|_{x=0} \neq 0$ (en vertu de (1.206)), et donc, la seule solution possible est:

$$A_1 = B_1 = 0 \quad (1.208)$$

autrement dit, la solution triviale $\Psi = 0$. Le même résultat est obtenu pour $\Psi(L) = 0$. En fait, $\left(\frac{d^2}{dx^2} + p^2\right)\phi_i = 0$ est une équation elliptique, et il n'y a donc

pas de solutions non-triviales si la fonction ϕ_1 et sa dérivée χ_2 doivent s'annuler simultanément aux murs de la boîte. Par ailleurs, si en $MQNR$, l'annulation entière de la fonction d'onde aux murs d'une boîte est considérée comme une extension self-adjointe de l'Hamiltonien libre, en MQR ceci n'est pas le cas. L'Hamiltonien libre de Dirac (1.198) ne possède donc pas la BC : ($\Psi(0) = 0$) et ($\Psi(L) = 0$) comme l'une de ses extensions self-adjointes. Par contre, prendre égale à 0, l'une seulement des composantes de Ψ (ϕ ou bien χ) comme BC , est physiquement acceptable. En effet, avec:

$$\phi_1(0) = \phi_1(L) = 0 \quad (1.209)$$

Ψ prend la forme:

$$\Psi(x) = 2A_1 \begin{pmatrix} i \sin px \\ 0 \\ 0 \\ \frac{p}{m+E} \cos px \end{pmatrix}; p = n\pi/L; n = 1, 2, \dots \quad (1.210)$$

et les densités de probabilité et de courant qui s'écrivent:

$$\begin{aligned} P &= \phi_1^* \phi_1 + \chi_2^* \chi_2 \\ \mathbf{J} &= \phi_1^* \chi_2 + \chi_2^* \phi_1 \end{aligned} \quad (1.211)$$

vérifient aux murs $x = 0$ et $x = L$, les conditions de symétrie

$$P(0) = P(L) \quad (1.212)$$

et d'impénétrabilité:

$$\mathbf{J}(0) = \mathbf{J}(L) = 0 \quad (1.213)$$

qui signifie que l'électron se trouve "*enfermé*" dans la boîte, i.e., qu'il n'y a pas de particules pour $x < 0$ ou $x > L$.

La condition (1.209) qui peut être utilisée si l'on veut que les murs de la boîte soient impénétrables, est une extension self-adjointe de l'Hamiltonien libre de Dirac.

Pareillement, avec la condition aux limites:

$$\chi_2(0) = \chi_2(L) = 0 \quad (1.214)$$

la fonction d'onde s'écrit:

$$\Psi(x) = 2A_1 \begin{pmatrix} \cos px \\ 0 \\ 0 \\ \frac{ip}{m+E} \sin px \end{pmatrix}; p = n\pi/L; n = 1, 2, \dots \quad (1.215)$$

et les conditions de symétrie et d'impénétrabilité (1.212 et 1.213) sont satisfaites. La BC (1.214) est aussi une extension self-adjointe de H_D .

On peut aussi obtenir une extension self-adjointe de H_D par l'extension de son domaine à celui des fonctions d'ondes périodiques et anti-périodiques dans Ω , en imposant la BC :

$$\Psi(0) = \pm \Psi(L) \quad (1.216)$$

à laquelle correspond la fonction d'onde:

$$\Psi(x) = C_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{p}{m+E} \end{pmatrix} e^{ipx} \quad (1.217)$$

avec $p = 2n\pi/L; n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ pour la condition périodique $\Psi(0) = +\Psi(L)$, et $p = (2n + 1)\pi/L$; pour la condition anti-périodique $\Psi(0) = -\Psi(L)$. La densité de courant vérifie:

$$J(0) = J(L) \neq 0 \quad (1.218)$$

et signifie que les murs sont transparents à la particule, qui voyage à travers la boîte dans une condition de résonance.

Rajoutons pour terminer, qu'une solution particulière [50] au problème de la particule de Dirac dans un puits unidimensionnel $V(x)$ infiniment profond:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < 0; & V_0 \rightarrow \infty \\ 0 & 0 \leq x \leq L \\ V_0 & x > 0; & V_0 \rightarrow \infty \end{cases} \quad (1.219)$$

a été donnée en assumant que la masse au repos de la particule est elle-même dépendante de x , et devient infinie à l'extérieur de la boîte:

$$m(x) = \begin{cases} M & x < 0; & M \rightarrow \infty \\ m & 0 \leq x \leq L \\ M & x > 0; & M \rightarrow \infty \end{cases} \quad (1.220)$$

ceci afin d'éviter le paradoxe de Klein, qui, rappelons-le, a lieu lorsque $|eV_0 - E| > m$ (Cf.1.44), et comme V_0 continue d'augmenter, l'issue pour ce problème a été d'assumer que la masse m de la particule est elle même fonction de x , et augmente en même temps que V_0 .

Chapter 2

RESOLUTION DE L'EQUATION DKP DANS LE POTENTIEL SCALAIRE DE WOODS-SAXON

2.1 Introduction

L'équation *DKP* est une extension du formalisme covariant de Dirac, aux particules scalaires de spin 0 et vectorielles de spin 1 [1] [2] [3], et dans lequel on remplace les matrices gamma (γ) par des matrices bêta (β), vérifiant une algèbre plus compliquée connue sous le nom de l'"*Algèbre DKP*". Cette similitude dans la structure entre l'équation *DKP* et celle de Dirac est plus que superficielle, et c'est ce dont a montré Bhabha [53, 54], lorsqu'il a dérivé un système de fonctions d'ondes relativistes du premier ordre pour des spins arbitraires, incluant ces deux équations comme cas particuliers.

Le système de Bhabha s'écrit:

$$(i\partial_\mu\alpha^\mu - \chi)\psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.1)$$

avec χ étant soit multiple, soit demi-multiple de masse, et les α^μ sont quatre matrices décrivant les propriétés de spin de la particule, et sont données par les représentations de l'algèbre de Lie $SO(5)$ [43]. Ces représentations sont de dimension:

$$d_5(\mathcal{S}, s) = \frac{1}{6} (2\mathcal{S} + 3)(2s + 1)[(\mathcal{S} + 1)(\mathcal{S} + 2) - s(s + 1)] \quad (2.2)$$

où \mathcal{S} et s tous deux entiers ou demi-entiers, s étant le spin de la particule, avec $\mathcal{S} \geq s \geq 0$, soit: $s = \mathcal{S}, \mathcal{S} - 1, \mathcal{S} - 2, \dots, 0$ ou $\frac{1}{2}$ (selon que \mathcal{S} est entier ou demi-entier)[42].

Pour $\mathcal{S} > 1$, les équations de Bhabha représentent des états multi-spins avec un spin maximum \mathcal{S} , et multi-masses avec $m = \frac{\chi}{\mathcal{S}}, \frac{\chi}{\mathcal{S}-1}, \frac{\chi}{\mathcal{S}-2}, \dots, \chi$ ou 2χ (selon que \mathcal{S} est entier ou demi-entier)[41]. Par exemple, pour $\mathcal{S} = \frac{3}{2}, \chi = \frac{3}{2}m, \frac{1}{2}m$, et pour $\mathcal{S} = 2, \chi = 2m, m$.

Pour $\mathcal{S} = \frac{1}{2}, d_5(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) = 4, \alpha^\mu = \frac{1}{2}\gamma^\mu, \chi = \frac{1}{2}m$, et l'équation (2.1) se réduit à l'équation d'onde du premier ordre de Dirac.

Pour $\mathcal{S} = 1, d_5(1, 1) = 10$ et $d_5(1, 0) = 5, \alpha^\mu = \beta^\mu, \chi = m$, et l'équation (2.1) se réduit à l'équation *DKP* :

$$(i\partial_\mu\beta^\mu - m)\psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.3)$$

qui, dans le cas de l'interaction avec un champ électromagnétique A^μ , prend la forme:

$$[i\beta^\mu(\partial_\mu + ieA_\mu) - m]\psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.4)$$

Les matrices β^μ possèdent trois représentations irréductibles, la triviale de dimension 0, et celles de dimensions 5 et 10, respectivement les représentations de spin $s = 0$ et $s = 1$ de l'équation *DKP*. Elles génèrent l'algèbre *DKP* :

$$\beta^\mu \beta^\nu \beta^\lambda + \beta^\lambda \beta^\nu \beta^\mu = g^{\mu\nu} \beta^\lambda + g^{\nu\lambda} \beta^\mu \quad (2.5)$$

et contrairement aux matrices des algèbres de spin demi-entier, tel que l'algèbre de Dirac, elles possèdent la propriété des algèbres de spin entier, celle d'être non inversibles [44].

On choisit une représentation pour les β^μ dans laquelle $\beta^{k+} = -\beta^k$, et $\beta^{0+} = \beta^0$ [29], et on écrit pour le spin 0 :

$$\beta^0 = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\theta} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \beta^i = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \rho^i \\ -\rho_T^i & \mathbf{0} \end{pmatrix}, i = 1, 2, 3 \quad (2.6)$$

avec

$$\boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \rho^1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \rho^2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \rho^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

et ρ_T représentant la matrice transposée de ρ , $\mathbf{0}$ étant la matrice nulle.

Et pour le spin 1 :

$$\beta^0 = \begin{pmatrix} 0 & \bar{0} & \bar{0} & \bar{0} \\ \bar{0}^T & \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \bar{0}^T & \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \bar{0}^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \beta^i = \begin{pmatrix} 0 & \bar{0} & e_i & \bar{0} \\ \bar{0}^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} & -is_i \\ -e_i^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \bar{0}^T & -is_i & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, i = 1, 2, 3 \quad (2.8)$$

avec $\bar{0}$ et e_i données par :

$$\bar{0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, e_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, e_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, e_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

et $\mathbf{1}$ et $\mathbf{0}$ étant respectivement, la matrice unité et la matrice nulle. Les s_i sont les matrices standards non-relativistes du spin 1 :

$$s_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, s_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, s_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

On définit par $\bar{\Psi}$

$$\bar{\psi} = \psi^+ [2(\beta^0)^2 - 1] \quad (2.11)$$

d'où

$$\bar{\psi}\beta^0 = \psi^+\beta^0 \quad (2.12)$$

avec $\bar{\Psi}$ étant l'adjoint de ψ , qui vérifie l'équation adjointe suivante:

$$i(\partial_\mu - ieA_\mu)\bar{\psi}\beta^\mu + m\bar{\psi} = 0 \quad (2.13)$$

Et sachant que:

$$\bar{\psi}\beta^\mu\beta^0 = \psi^+\beta^{\mu+}\beta^0 \quad (2.14)$$

on tire l'équation de continuité:

$$\partial_\mu J^\mu = 0 \quad (2.15)$$

où J^μ est défini par:

$$J^\mu = (J^0, J^k) = \bar{\psi}\beta^\mu\psi \quad (2.16)$$

avec

$$J^k = \bar{\psi}\beta^k\psi \quad (2.17)$$

la densité de courant, et

$$J^0 = \bar{\psi}\beta^0\psi \quad (2.18)$$

la densité de probabilité qui n'est pas définie positive, comme c'est le cas avec les équations de Proca et de *KG*. Il est donc nécessaire de recourir à la réinterprétation de Pauli et Weisskopf qui est basée sur la symétrie de charge, en multipliant J^0 par la charge élémentaire e . On passe ainsi de la notion de densité de probabilité à celle de densité de charge électrique.

Dans ce qui suit, nous allons calculer les solutions exactes de l'équation *DKP*, pour des particules de spin 0 et 1 en interaction avec le potentiel scalaire de *WS* (Cf. Fig 5), défini par:

$$V(z) = \frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{|z|-a}{r}\right)} \quad (2.19)$$

où V_0 est réel et positif. Les paramètres de forme r et de largeur a , sont réels, positifs et ajustables, de sorte à permettre de traiter différents systèmes, et de simuler des modèles de potentiels continus et d'infinies ou finies barrières -ou puits lorsque V_0 est négatif- avec le même rendement [30].

Ce potentiel est d'un très grand intérêt dans le domaine de la physique. En effet, le rôle exceptionnel joué par les nombres nucléaires magiques dans les noyaux atomiques, a révélé l'existence d'un champ moyen pouvant être approximé

par ce potentiel [24], et a g n r  le mod le nucl aire en couches [25], ainsi que plusieurs approches d'autres champs moyens. Le potentiel de *WS* a aussi  t  utilis  comme potentiel absorbant en physique mol culaire, dans l' tude de la photodissociation, des r actions chimiques, et des processus de laser induit. De plus, il a  t  utilis  comme potentiel internucl aire dans les r actions des ions lourds [26], notamment dans la fusion   des  nergies proches de la barri re de Coulomb [27]. Et dans le cas des bosons de *KG*, notons que pour certaines valeurs de V_0 , r et a , le puits de potentiel *WS*, exhibe un comportement caract ristique des potentiels de courte port e (2a), et r v le l'existence d' tats li s d'antiparticules [28].

Pour ce potentiel unidimensionnel et ind pendant du temps, l' quation (2.4) s' crit:

$$\left[i\beta^0 \left(\frac{\partial}{\partial t} + ieV \right) + i\beta^3 \frac{d}{dz} - m \right] \psi(z, t) = 0 \quad (2.20)$$

les  tats stationnaires $\psi(z, t)$ sont de la forme:

$$\psi(z, t) = e^{-iEt} \widetilde{\phi}(z) \quad (2.21)$$

d'o :

$$\left[\beta^0 (E - eV) + i\beta^3 \frac{d}{dz} - m \right] \widetilde{\phi}(z) = 0 \quad (2.22)$$

En faisant tendre $r \rightarrow 0^+$ dans (2.19), on obtient la barri re de potentiel:

$$\begin{aligned} V(z) &= V_0 \theta(a - |z|) \\ &= \begin{cases} V_0 & \text{pour } |z| \leq a \\ 0 & \text{pour } |z| > a \end{cases} \end{aligned} \quad (2.23)$$

pour laquelle, l' quation *DKP* (2.22) avec les conditions aux limites habituelles, qui sont la continuit  de la fonction d'onde $\widetilde{\phi}(z_0^+) = \widetilde{\phi}(z_0^-)$ en $z_0 = \pm a$, nous conduit directement   la solution triviale $\widetilde{\phi}(z) = 0$. En effet, comme nous le verrons dans ce qui suit, les composantes de Ψ v rifient l' quation du second ordre de *KG*, ce qui exige la continuit  en z_0 , de Ψ et de sa d riv e, i.e. $\Psi(z_0^+) = \Psi(z_0^-)$ et $\Psi'(z_0^+) = \Psi'(z_0^-)$, par cons quent, $\Theta(z_0^+) = \Theta(z_0^-)$, mais pour ce qui concerne les composantes de Ω qui s' crivent:

$$\Omega(z_0^+) = \frac{(E - eV(z_0^+))}{m} \Psi(z_0^+), \text{ et } \Omega(z_0^-) = \frac{(E - eV(z_0^-))}{m} \Psi(z_0^-) \quad (2.24)$$

satisfaire $\Omega(z_0^+) = \Omega(z_0^-)$ en sachant que $V(z_0^+) \neq V(z_0^-)$, entra ne d'embl e la solution triviale, et c'est en fait pour  viter cette difficult  que l'on proc dera

d'abord par travailler avec le potentiel continu (2.19). La barrière (2.23) sera ensuite traitée comme un cas limite. Une telle procédure a été utilisée dans le cas de l'équation de *FV* [31, 32], où il a été démontré que la situation était comparable à celle des ondes électromagnétiques traversant deux milieux différents. Ceci n'est pas pour surprendre à partir du moment que les équations de Maxwell ne sont autres que celles de *DKP* avec $m = 0$ [33].

2.2 Solution de l'équation DKP pour les particules de spin 1

Pour les particules de spin 1, les matrices β^μ sont de dimension 10×10 , et $\widetilde{\phi}(z)$ s'écrit:

$$\widetilde{\phi}(z)^T = (\varphi, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}) \quad (2.25)$$

avec \mathbf{A}, \mathbf{B} et \mathbf{C} vecteurs de composantes respectives A_i, B_i et $C_i, i = 1, 2, 3$. Il découle du système (2.22) les trois systèmes suivants:

$$\left\{ \begin{array}{l} O_{KG}A_1 = 0 \\ B_1 = \frac{E-eV}{m} A_1 \\ C_2 = \frac{i}{m} \frac{dA_1}{dz} \end{array} \right. ; \left\{ \begin{array}{l} O_{KG}A_2 = 0 \\ B_2 = \frac{E-eV}{m} A_2 \\ C_1 = -\frac{i}{m} \frac{dA_2}{dz} \end{array} \right. ; \left\{ \begin{array}{l} O_{KG}B_3 = 0 \\ A_3 = \frac{E-eV}{m} B_3 \\ \varphi = \frac{i}{m} \frac{dB_3}{dz} \end{array} \right. \quad (2.26)$$

avec $C_3 = 0$, et $O_{KG} = [(E - eV)^2 - m^2] + \frac{d^2}{dz^2}$ l'opérateur de *KG*. Eu égard aux équations qu'elles vérifient, nous réorganisons les composantes de $\widetilde{\phi}(z)$ comme suit [22] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(z)^T = (A_1, A_2, B_3) \\ \Omega(z)^T = (B_1, B_2, A_3) \\ \Theta(z)^T = (C_2, -C_1, \varphi) \end{array} \right. \quad (2.27)$$

et nous désignerons par:

$$\phi(z)^T = (\Psi, \Omega, \Theta)^T \quad (2.28)$$

la solution du système (2.22), où seules les composantes de Ψ sont indépendantes et satisfont l'équation de *KG* :

$$O_{KG}\Psi = 0 \quad (2.29)$$

les autres satisfaisant:

$$\left(\begin{array}{c} \Omega \\ \Theta \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \frac{E-eV}{m} \\ \frac{i}{m} \frac{d}{dz} \end{array} \right) \otimes \Psi \quad (2.30)$$

Remarquons que les subcomposantes Ψ et Ω de $\phi(z)$, jouent un rôle similaire à celui de la somme et de la différence des deux composantes de la fonction d'onde de l'équation de FV [8]. On pourrait ainsi avancer qu'ils expriment la symétrie de charge existant dans le problème [55].

Pour solutionner l'équation (2.29), on introduit le changement de variables suivant:

$$y = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{|z|-a}{r}\right)} \quad (2.31)$$

et moyennant les relations suivantes:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Psi}{dz^2} &= \left(\frac{d^2\Psi}{dy^2}\right) \left(\frac{dy}{dz}\right)^2 + \left(\frac{d\Psi}{dy}\right) \left(\frac{d^2y}{dz^2}\right) \\ \frac{d^2y}{dz^2} &= \frac{1}{r^2}y(1-y)(1-2y) \\ \frac{dy}{dz} &= \pm\frac{1}{r}y(1-y) \end{aligned} \quad (2.32)$$

nous obtenons:

$$\frac{1}{r^2}y^2(1-y)^2 \frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{1}{r^2}y(1-y)(1-2y) \frac{d\Psi}{dy} + [(E - eV_0y)^2 - m^2] \Psi = 0 \quad (2.33)$$

dont les solutions particulières sont des fonctions spéciales appartenant à la classe des fonctions hypergéométriques (Cf. **A.3**). En effet, en utilisant la substitution

$$\Psi = Cy^\mu(1-y)^\nu \tilde{\Psi} \quad (2.34)$$

où C est une constante complexe, (2.33) se réduit à l'équation de type hypergéométrique suivante:

$$y(1-y) \frac{d^2\tilde{\Psi}}{dy^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)y] \frac{d\tilde{\Psi}}{dy} - \alpha\beta\tilde{\Psi} = 0 \quad (2.35)$$

avec

$$\begin{cases} \alpha = \left(\mu + \nu + \frac{1}{2}\right) - \frac{\nu_0}{2} \\ \beta = \left(\mu + \nu + \frac{1}{2}\right) + \frac{\nu_0}{2} \\ \gamma = 1 + 2\mu \\ \mu^2 = r^2(m^2 - E^2), \mu = irk \text{ avec } k \text{ réel } (|E| > m) \\ \nu^2 = r^2[m^2 - (E - eV_0)^2], \nu = irp \text{ avec } p \text{ réel} \\ \nu_0 = \sqrt{(1 - 2reV_0)(1 + 2reV_0)} \end{cases} \quad (2.36)$$

dont la solution $\tilde{\Psi}$ s'écrit comme une combinaison linéaire des solutions particulières linéairement indépendantes $\tilde{\Psi}_1$ et $\tilde{\Psi}_2$:

$$\begin{cases} \tilde{\Psi}_1(y) = {}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, y) \\ \tilde{\Psi}_2(y) = y^{1-\gamma} {}_2F_1(\alpha - \gamma + 1, \beta - \gamma + 1, 2 - \gamma, y) \\ \gamma \neq 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{cases} \quad (2.37)$$

Remarquons que $\tilde{\Psi}_1$ et $\tilde{\Psi}_2$ ne sont pas uniques, on en cite:

$$\begin{cases} \tilde{\Psi}_1(y) = {}_2F_1(\alpha, \beta, \alpha + \beta - \gamma + 1, 1 - y) \\ \tilde{\Psi}_2(y) = (1 - y)^{\gamma - \alpha - \beta} {}_2F_1(\gamma - \alpha, \gamma - \beta, \gamma - \alpha - \beta + 1, 1 - y) \end{cases} \quad (2.38)$$

et

$$\begin{cases} \tilde{\Psi}_1(y) = y^{-\alpha} {}_2F_1(\alpha, \alpha - \gamma + 1, \alpha - \beta + 1, \frac{1}{y}) \\ \tilde{\Psi}_2(y) = y^{-\beta} {}_2F_1(\beta, \beta - \gamma + 1, \beta - \alpha + 1, \frac{1}{z}) \end{cases} \quad (2.39)$$

Finalement, Ψ s'écrit pour $z < 0$:

$$\Psi(y) = [A y^{-\mu} (1 - y)^\nu {}_2F_1(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, y) + B y^\mu (1 - y)^\nu {}_2F_1(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2, y)] \mathbf{V} \quad (2.40)$$

avec A et B étant des constantes complexes, \mathbf{V} vecteur constant de composantes N_1, N_2 et N_3 relatives aux trois directions du spin 1 :

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{pmatrix} \quad (2.41)$$

et

$$\begin{cases} \alpha_1 = (-\mu + \nu + \frac{1}{2}) - \frac{\nu_0}{2} \\ \beta_1 = (-\mu + \nu + \frac{1}{2}) + \frac{\nu_0}{2} \\ \gamma_1 = 1 - 2\mu \end{cases}, \begin{cases} \alpha_2 = (\mu + \nu + \frac{1}{2}) - \frac{\nu_0}{2} \\ \beta_2 = (\mu + \nu + \frac{1}{2}) + \frac{\nu_0}{2} \\ \gamma_2 = 1 + 2\mu \end{cases} \quad (2.42)$$

Et en utilisant la propriété hypergéométrique suivante:

$$\frac{d}{dy} {}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, y) = \frac{\alpha\beta}{\gamma} {}_2F_1(\alpha + 1, \beta + 1, \gamma + 1, y) \quad (2.43)$$

on écrit $\phi(z)$ sous la forme matricielle suivante:

$$\begin{aligned} \phi(z) &= A y^{-\mu} (1 - y)^\nu [{}_2F_1(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, y)M_1(y) \\ &\quad + {}_2F_1(\alpha_1 + 1, \beta_1 + 1, \gamma_1 + 1, y)N_1(y)] \otimes V \\ &\quad + B y^\mu (1 - y)^\nu [{}_2F_1(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2, y)M_2(y) \\ &\quad + {}_2F_1(\alpha_2 + 1, \beta_2 + 1, \gamma_2 + 1, y)N_2(y)] \otimes V \end{aligned} \quad (2.44)$$

où $M_1(y), M_2(y), N_1(y), N_2(y)$ sont des vecteurs de dimensions (3×1) définis par:

$$\begin{aligned}
 M_1(y) &= \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E - eV_0 y}{m} \\ \frac{i}{rm} [-\mu + y(\mu - \nu)] \end{pmatrix}; & N_1(y) &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{i}{rm} \frac{\alpha_1 \beta_1}{\gamma_1} y(1 - y) \end{pmatrix} \\
 M_2(y) &= \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E - eV_0 y}{m} \\ \frac{i}{rm} [\mu - y(\mu + \nu)] \end{pmatrix}; & N_2(y) &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{i}{rm} \frac{\alpha_2 \beta_2}{\gamma_2} y(1 - y) \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{2.45}$$

Pareillement pour $z > 0$, $\phi(z)$ s'écrit:

$$\begin{aligned}
 &\phi(z) \\
 &= C y^{-\mu} (1 - y)^\nu [{}_2F_1(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, y) M'_1(y) \\
 &\quad + {}_2F_1(\alpha_1 + 1, \beta_1 + 1, \gamma_1 + 1, y) N'_1(y)] \otimes V \\
 &\quad + D y^\mu (1 - y)^\nu [{}_2F_1(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2, y) M'_2(y) \\
 &\quad + {}_2F_1(\alpha_2 + 1, \beta_2 + 1, \gamma_2 + 1, y) N'_2(y)] \otimes V
 \end{aligned} \tag{2.46}$$

avec C et D constantes complexes, et $M'_1(y), M'_2(y), N'_1(y), N'_2(y)$ définis par:

$$\begin{aligned}
 M'_1(y) &= \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E - eV_0 y}{m} \\ -\frac{i}{rm} [-\mu + y(\mu - \nu)] \end{pmatrix}; & N'_1(y) &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{i}{rm} \frac{\alpha_1 \beta_1}{\gamma_1} y(1 - y) \end{pmatrix} \\
 M'_2(y) &= \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E - eV_0 y}{m} \\ -\frac{i}{rm} [\mu - y(\mu + \nu)] \end{pmatrix}; & N'_2(y) &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{i}{rm} \frac{\alpha_2 \beta_2}{\gamma_2} y(1 - y) \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{2.47}$$

En introduisant la variable z , $\phi(z)$ s'écrit de façon unifiée:

$$\phi(z) = \tag{2.48}$$

$$\begin{aligned} & \theta(-z) \left\{ A \left(1 + e^{-\frac{z+a}{r}}\right)^{-\mu} \left(\frac{e^{-\frac{z+a}{r}}}{1 + e^{-\frac{z+a}{r}}}\right)^\nu \left[{}_2F_1(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, y) M_1 \left(\frac{1}{1 + e^{-\frac{z+a}{r}}}\right) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + {}_2F_1(\alpha_1 + 1, \beta_1 + 1, \gamma_1 + 1, y) N_1 \left(\frac{1}{1 + e^{-\frac{z+a}{r}}}\right) \right] \right. \\ & \quad \left. + B \left(1 + e^{-\frac{z+a}{r}}\right)^\mu \left(\frac{e^{-\frac{z+a}{r}}}{1 + e^{-\frac{z+a}{r}}}\right)^\nu \left[{}_2F_1(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2, y) M_2 \left(\frac{1}{1 + e^{-\frac{z+a}{r}}}\right) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + {}_2F_1(\alpha_2 + 1, \beta_2 + 1, \gamma_2 + 1, y) N_2 \left(\frac{1}{1 + e^{-\frac{z+a}{r}}}\right) \right] \right\} \otimes V \\ & + \theta(z) \left\{ C \left(1 + e^{\frac{z-a}{r}}\right)^{-\mu} \left(\frac{e^{\frac{z-a}{r}}}{1 + e^{\frac{z-a}{r}}}\right)^\nu \left[{}_2F_1(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, y) M'_1 \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{z-a}{r}}}\right) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + {}_2F_1(\alpha_1 + 1, \beta_1 + 1, \gamma_1 + 1, y) N'_1 \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{z-a}{r}}}\right) \right] \right. \\ & \quad \left. + D \left(1 + e^{\frac{z-a}{r}}\right)^\mu \left(\frac{e^{\frac{z-a}{r}}}{1 + e^{\frac{z-a}{r}}}\right)^\nu \left[{}_2F_1(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2, y) M'_2 \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{z-a}{r}}}\right) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + {}_2F_1(\alpha_2 + 1, \beta_2 + 1, \gamma_2 + 1, y) N'_2 \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{z-a}{r}}}\right) \right] \right\} \otimes V \end{aligned}$$

La continuité de $\phi(z)$ en $z = 0$, équivaut à celle de Ψ et Ψ' en $z = 0$, soit à celle de A_1 et C_2 , A_2 et C_1 , B_3 et φ , en $z = 0$, d'où:

$$\begin{cases} A K_1 + B K_2 = C K_1 + D K_2 \\ A G_1 + B G_2 = -C G_1 - D G_2 \end{cases} \tag{2.49}$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} K_1 = [y^{-\mu} (1-y)^\nu {}_2F_1(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, y)]_{y=\lambda} \\ K_2 = [y^\mu (1-y)^\nu {}_2F_1(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2, y)]_{y=\lambda} \\ G_1 = K_1 [-\mu + y(\mu - \nu)]_{y=\lambda} \\ \quad + [y^{-\mu+1} (1-y)^{\nu+1} \frac{\alpha_1 \beta_1}{\gamma_1} {}_2F_1(\alpha_1 + 1, \beta_1 + 1, \gamma_1 + 1, y)]_{y=\lambda} \\ G_2 = K_2 [\mu - y(\mu + \nu)]_{y=\lambda} \\ \quad + [y^{\mu+1} (1-y)^{\nu+1} \frac{\alpha_2 \beta_2}{\gamma_2} {}_2F_1(\alpha_2 + 1, \beta_2 + 1, \gamma_2 + 1, y)]_{y=\lambda} \\ \lambda = \frac{1}{1 + \exp(-\frac{a}{r})} = y(z=0) \end{array} \right. \quad (2.50)$$

2.2.1 Comportement asymptotique

Etudier le comportement asymptotique de la fonction d'onde au voisinage de $l'\infty$, nous amène à déterminer les coefficients de réflexion et de transmission. En effet, sachant que lorsque $|z| \rightarrow \infty, y \rightarrow 0$, et utilisant les limites suivantes:

$$\begin{aligned} \lim_{y \rightarrow 0} y^\mu &= e^{-\frac{\mu}{r}(|z|-a)} \\ \lim_{y \rightarrow 0} (1-y)^\nu &= 1 \\ \lim_{y \rightarrow 0} {}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, y) &= 1 \end{aligned} \quad (2.51)$$

nous obtenons:

$$\phi(z) \xrightarrow{z \rightarrow -\infty} A e^{-ik(z+a)} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E}{m} \\ \frac{i\mu}{rm} \end{pmatrix} \otimes V + B e^{ik(z+a)} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E}{m} \\ \frac{i\mu}{rm} \end{pmatrix} \otimes V \quad (2.52)$$

et

$$\phi(z) \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} C e^{ik(z-a)} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E}{m} \\ \frac{i\mu}{rm} \end{pmatrix} \otimes V + D e^{-ik(z-a)} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E}{m} \\ -\frac{i\mu}{rm} \end{pmatrix} \otimes V \quad (2.53)$$

D'où les nouvelles définitions des coefficients:

Les coefficients B et D respectivement coefficients des fonctions d'ondes incidentes, de $-\infty \longrightarrow 0$ et de $+\infty \longrightarrow 0$. Avec $D = 0$ car nous choisissons pour l'onde incidente de se propager de $-\infty \longrightarrow 0$.

Les coefficients A et C respectivement coefficients des ondes, réfléchie et transmise.

Les coefficients de réflexion \mathbf{R} et de transmission \mathbf{T} s'écrivent:

$$\mathbf{R} = \frac{|J_{ref}|}{|J_{inc}|}, \mathbf{T} = \frac{|J_{trans}|}{|J_{inc}|} \quad (2.54)$$

avec $J (\equiv J^3)$ donné par (2.17) :

$$J = \bar{\psi} \beta^3 \psi \quad (2.55)$$

et l'on écrit selon chaque direction i du spin 1 :

$$\begin{cases} J_1 = -(\Psi_1^* \Theta_1 + \Psi_1 \Theta_1^*) N_1^2 = -(A_1^* C_2 + A_1 C_2^*) \\ J_2 = -(\Psi_2^* \Theta_2 + \Psi_2 \Theta_2^*) N_2^2 = (A_2^* C_1 + A_2 C_1^*) \\ J_3 = -(\Psi_3^* \Theta_3 + \Psi_3 \Theta_3^*) N_3^2 = -(B_3^* \varphi + B_3 \varphi^*) \end{cases} \quad (2.56)$$

ou encore

$$\begin{cases} J_{iG} = 2N_i^2 \frac{k}{m} [|B|^2 - |A|^2] \\ J_{iD} = 2N_i^2 \frac{k}{m} |C|^2 \end{cases} \quad (2.57)$$

avec

$$\begin{aligned} J_{iG} &\equiv J_{z<0} = J_{inc} - J_{ref} \\ J_{iD} &\equiv J_{z>0} = J_{trans} \end{aligned} \quad (2.58)$$

Nous déduisons alors les coefficients \mathbf{R} et \mathbf{T} :

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \frac{|A|^2}{|B|^2} \\ \mathbf{T} &= \frac{|C|^2}{|B|^2} \end{aligned} \quad (2.59)$$

qui, sachant que $J_{iG} = J_{iD}$ en vertu de la conservation de la charge [57], vérifient:

$$\mathbf{R} + \mathbf{T} = 1 \quad (2.60)$$

En mettant $D = 0$ dans (2.49) nous obtenons:

$$\begin{cases} A = B \frac{K_1 G_2 + K_2 G_1}{-2K_1 G_1} \\ C = B \frac{K_1 G_2 - K_2 G_1}{-2K_1 G_1} \end{cases} \quad (2.61)$$

et \mathbf{R} et \mathbf{T} s'écrivent alors:

$$\mathbf{R} = \frac{1}{4} \left| \lambda^{2\mu} \right|^2 \left| \frac{F_6}{F_5} + \frac{F_2}{F_1} \right|^2 \quad (2.62)$$

et

$$\mathbf{T} = \frac{1}{4} \left| \lambda^{2\mu} \right|^2 \left| \frac{F_6}{F_5} - \frac{F_2}{F_1} \right|^2 \quad (2.63)$$

avec:

$$\begin{aligned} F_1 &= {}_2F_1(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, \lambda) \\ F_2 &= {}_2F_1(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2, \lambda) \\ F_3 &= {}_2F_1(\alpha_1 + 1, \beta_1 + 1, \gamma_1 + 1, \lambda) \\ F_4 &= {}_2F_1(\alpha_2 + 1, \beta_2 + 1, \gamma_2 + 1, \lambda) \\ F_5 &= [-\mu + \lambda(\mu - \nu)] F_1 + \lambda(1 - \lambda) \frac{\alpha_1 \beta_1}{\gamma_1} F_3 \\ F_6 &= [\mu - \lambda(\mu + \nu)] F_2 + \lambda(1 - \lambda) \frac{\alpha_2 \beta_2}{\gamma_2} F_4 \end{aligned} \quad (2.64)$$

2.2.2 Cas de la barrière de potentiel

Sachant que $\lim_{r \rightarrow 0} y = 1$ pour $(|z| - a) \leq 0$, et en utilisant la propriété hypergéométrique:

$$\begin{aligned} {}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, y) &= \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha) \Gamma(\gamma - \beta)} {}_2F_1(\alpha, \beta, \alpha + \beta - \gamma + 1, 1 - y) \\ &+ \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\alpha + \beta - \gamma)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\beta)} (1 - y)^{\gamma - \alpha - \beta} {}_2F_1(\gamma - \alpha, \gamma - \beta, \gamma - \alpha - \beta + 1, 1 - y) \end{aligned} \quad (2.65)$$

et les limites suivantes:

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0} {}_2F_1(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, y) &= \frac{k+p}{2p} + \frac{p-k}{2p} e^{-2ip(|z|-a)} \\ \lim_{r \rightarrow 0} {}_2F_1(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2, y) &= \frac{p-k}{2p} + \frac{k+p}{2p} e^{-2ip(|z|-a)} \\ \lim_{r \rightarrow 0} y^\nu &= \lim_{r \rightarrow 0} y^\mu = 1 \\ \lim_{r \rightarrow 0} (1 - y)^\nu &= e^{ip(|z|-a)} \\ \lim_{r \rightarrow 0} \frac{i}{r^m} \frac{\alpha_1 \beta_1}{\gamma_1} &= \frac{k-p}{m} \\ \lim_{r \rightarrow 0} \frac{i}{r^m} \frac{\alpha_2 \beta_2}{\gamma_2} &= -\frac{k+p}{m} \end{aligned} \quad (2.66)$$

avec $\Gamma(x)$ étant la fonction gamma, nous obtenons:

$$\begin{aligned} \phi_0(z) = \theta(-z) & \left\{ \left[\frac{A(k+p) + B(p-k)}{2p} e^{ip(|z|-a)} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{A(p-k) + B(k+p)}{2p} e^{-ip(|z|-a)} \right] \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E-\epsilon V_0}{m} \\ \frac{p}{m} \end{pmatrix} \otimes V \\ & + \theta(z) \left\{ C \frac{k+p}{2p} e^{ip(|z|-a)} + C \frac{p-k}{2p} e^{-ip(|z|-a)} \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E-\epsilon V_0}{m} \\ -\frac{p}{m} \end{pmatrix} \otimes V \end{aligned} \quad (2.67)$$

De même, sachant que $\lim_{r \rightarrow 0} y = 0$ pour $(|z| - a) > 0$, et en utilisant les limites suivantes:

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0} {}_2F_1(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, y) &= \lim_{r \rightarrow 0} {}_2F_1(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2, y) = 1 \\ \lim_{r \rightarrow 0} y^\nu &= e^{-ip(|z|-a)}; \quad \lim_{r \rightarrow 0} y^\mu = e^{-ik(|z|-a)} \\ \lim_{r \rightarrow 0} (1-y)^\nu &= \lim_{r \rightarrow 0} (1-y)^\mu = 1 \end{aligned} \quad (2.68)$$

nous obtenons:

$$\begin{aligned} \phi_0(z) = \\ \theta(-z) & \left[A e^{-ik(z+a)} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E}{m} \\ \frac{k}{m} \end{pmatrix} + B e^{ik(z+a)} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E}{m} \\ -\frac{k}{m} \end{pmatrix} \right] \otimes V + \theta(z) C e^{ik(z-a)} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E}{m} \\ -\frac{k}{m} \end{pmatrix} \otimes V \end{aligned} \quad (2.69)$$

Et comme nous avons aussi: $\lim_{|z| \rightarrow \infty} y = 0$, la forme asymptotique de $\phi(z)$ sera alors donnée par (2.69), et on écrit:

$$\phi_0(z) = \left\{ \theta(z) e^{ik(z-a)} V_{tr} + \theta(-z) [e^{-ik(z+a)} V_{ref} + e^{ik(z+a)} V_{inc}] \right\} \otimes V \quad (2.70)$$

avec

$$V_{tr} = C \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E}{m} \\ -\frac{k}{m} \end{pmatrix}; \quad V_{ref} = A \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E}{m} \\ \frac{k}{m} \end{pmatrix}; \quad V_{inc} = B \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E}{m} \\ -\frac{k}{m} \end{pmatrix} \quad (2.71)$$

Les coefficients \mathbf{R} et \mathbf{T} sont respectivement calculés à partir de (2.62) et (2.63), en utilisant les limites suivantes:

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0^+} \lambda &= 1 \\ \lim_{r \rightarrow 0^+} (1 - \lambda)^\nu &= e^{-ipa} \\ \lim_{r \rightarrow 0^+} \lambda^{-2\mu} &= 1 \\ \lim_{r \rightarrow 0^+} (1 - \lambda) F_3 &= (1 - \lambda) F_4 = e^{2ipa} \end{aligned} \tag{2.72}$$

tout en sachant que pour tout complexe u et v nous avons:

$$|u + v|^2 = |u|^2 + |v|^2 + 2 \operatorname{Re} vu^* \tag{2.73}$$

Nous obtenons:

$$\mathbf{R} = \frac{\left(\frac{k^2 - p^2}{2pk}\right)^2 \sin^2 2pa}{1 + \left(\frac{k^2 - p^2}{2pk}\right)^2 \sin^2 2pa} \tag{2.74}$$

$$\mathbf{T} = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 - p^2}{2pk}\right)^2 \sin^2 2pa} \tag{2.75}$$

qui vérifient effectivement (2.60) : $\mathbf{R} + \mathbf{T} = 1$.

Ces relations expriment des caractéristiques que l'on ne peut pas retrouver dans le cas des particules non-relativistes décrites par l'équation de Schrödinger. En effet, ces dernières ne peuvent pas traverser une barrière infinie, alors que le peuvent les particules relativistes, dont les particules *DKP* en vertu de ce que l'on appelle le "*Tunnel de Klein*", qui, quoique instauré à l'origine pour les fermions, est utilisé pour les bosons via le phénomène de création de paires particule-antiparticule [11, 34].

Dans la limite de la masse nulle, l'équation *DKP* pour la particule de spin 1 se réduit à une équation à 6 composantes (équations de Maxwell), où le potentiel joue le rôle de source. On pourrait alors établir une analogie entre ces coefficients de réflexion et de transmission, et ceux des ondes électromagnétiques qui traversent une surface séparant deux milieux d'indices différents, n_1 et n_2 .

Les particules *DKP* peuvent faire l'objet d'une transmission de résonance ($\mathbf{R}=0, \mathbf{T}=1$) correspondant aux valeurs d'énergie: $E_N = eV_0 - \sqrt{m^2 + \frac{N^2 \pi^2}{4a^2}}$, lorsque $2pa = N\pi$. Nous procédons en effet à la résolution numérique de

l'équation (2.75) illustrant le coefficient de transmission T , en choisissant $a = 2$ pour les figures 7 et 9, et $a = 4$ pour les figures 8 et 10.

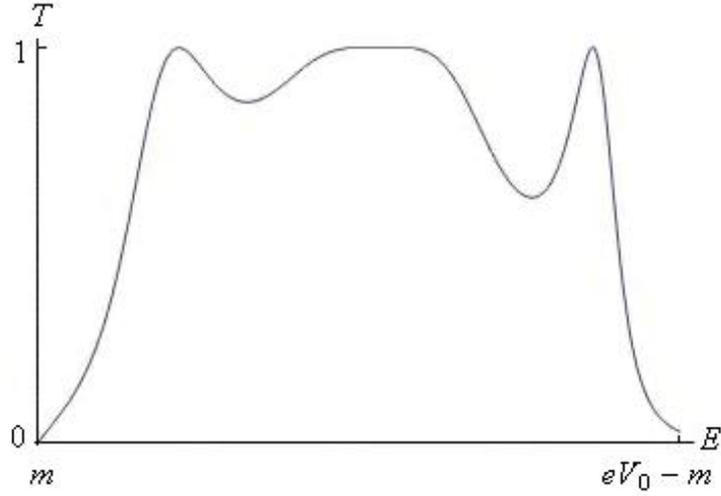


Figure 7. Coefficient de transmission pour la barrière de potentiel de WS . Le graphe illustre T pour différentes énergies E , avec $a = 2$, $eV_0 = 4$, et $m = 1$.

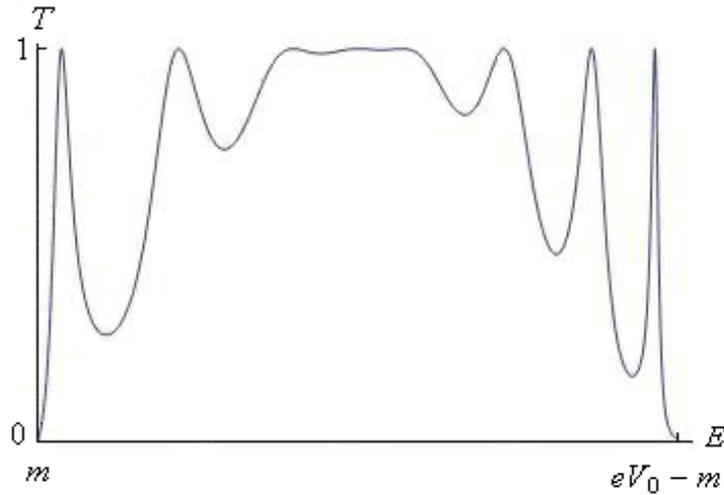


Figure 8. Coefficient de transmission pour la barrière de potentiel de WS . Le graphe illustre T pour différentes énergies E , avec $a = 4$, $eV_0 = 4$, et $m = 1$.

A partir des figures 7 et 8, on peut voir que comme dans le cas des particules de Dirac [35] et des particules de spin 0 de KG [28], la particule DKP affiche des transmissions de résonance sur l'intervalle de Klein: $m < E < eV_0 - m$.

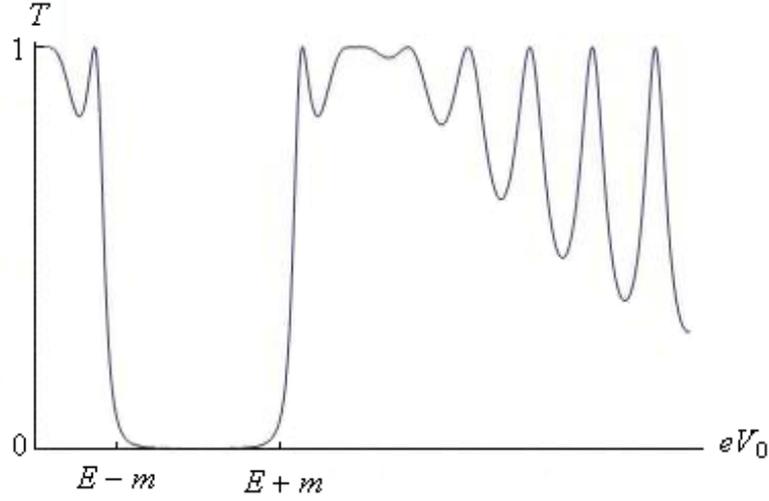


Figure 9. Coefficient de transmission pour la barrière de potentiel de *WS*. Le graphe illustre T pour différentes hauteurs de la barrière V_0 , avec $a = 2$, $m = 1$, $E = 2m$.

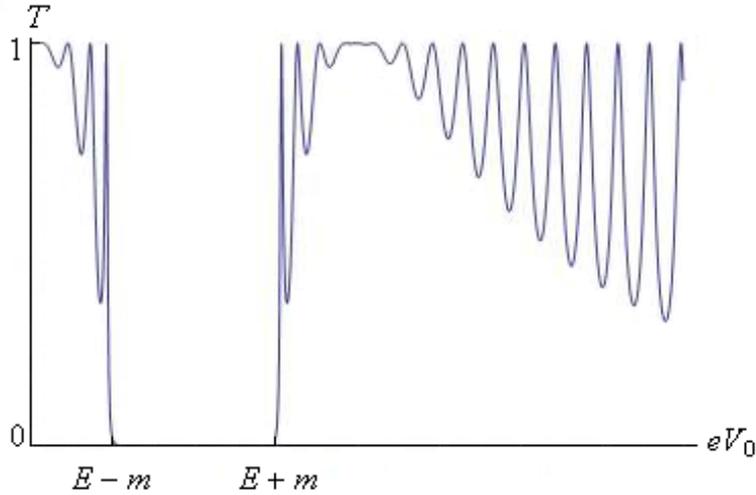


Figure 10. Coefficient de transmission pour la barrière de potentiel de *WS*. Le graphe illustre T pour différentes hauteurs de la barrière V_0 , avec $a = 4$, $m = 1$, $E = 2m$.

A partir des figures 9 et 10, on voit aussi que comme dans le cas des particules de Dirac [35] et les particules de spin 0 de *KG* [28], la particule *DKP* affiche des transmissions de résonance pour $eV_0 > E + m$ (soit $E < eV_0 - m$), et une transmission nulle pour $E - m < eV_0 < E + m$ (soit $eV_0 - m < E < eV_0 + m$).

2.2.3 Conditions aux limites

La barrière de potentiel (2.23) admet un saut en $z_0 = -a$, et $z_0 = +a$. On écrit de façon générale:

$$V(z) = \begin{cases} V_1 & \text{si } z < z_0 \\ V_2 & \text{si } z > z_0 \end{cases} \quad (2.76)$$

Rappelons que Ψ qui satisfait l'équation de KG (Cf. 2.29), devrait être continue ainsi que sa dérivée, en z_0 , d'où la solution triviale. On écrit :

$$\begin{cases} \Psi(z_0^+) = \Psi(z_0^-) \\ \frac{d\Psi}{dz}(z_0^+) = \frac{d\Psi}{dz}(z_0^-) \end{cases} \quad (2.77)$$

de même pour Θ et Ω (Cf. 2.30), qui devraient être continues en z_0 , nous écrivons:

$$\begin{cases} \Theta(z_0^+) = \Theta(z_0^-) \\ \Omega(z_0^+) = \frac{E - eV_2}{E - eV_1} \Omega(z_0^-) \end{cases} \quad (2.78)$$

Nous rassemblons les conditions aux limites ci-dessus, en une seule écriture matricielle -suivant une direction i du spin 1-:

$$\begin{pmatrix} \Psi(z_0^+) \\ \Omega(z_0^+) \\ \Theta(z_0^+) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{E - eV_2(z_0^+)}{E - eV_1(z_0^-)} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi(z_0^-) \\ \Omega(z_0^-) \\ \Theta(z_0^-) \end{pmatrix} \quad (2.79)$$

et ceci est comparable au cas d'un photon (particule DKP de masse nulle) traversant deux régions différentes [33]. La composante électrique tangentielle étant continue, et la composante magnétique normale discontinue.

Ces conditions aux limites se répercutent sur les densités de charge et de courant. En effet, la densité de charge s'écrit:

$$J^0 = \Psi^+ \Omega + \Omega^+ \Psi = 2 \frac{E - eV}{m} \Psi^+ \Psi \quad (2.80)$$

d'où

$$J^0(z_0^+) = \frac{E - eV_2}{E - eV_1} J^0(z_0^-) \quad (2.81)$$

et elle est donc discontinue. Elle donne le signe de la charge de la particule transmise, en fonction du potentiel, et de la densité de charge et de l'énergie E de la particule incidente. Si $\frac{E - eV_2}{E - eV_1} < 0$, les densités de charge $J^0(z_0^+)$ et $J^0(z_0^-)$ sont

de signes opposés, signifiant qu'on a une création de paire particule-antiparticule au voisinage de la barrière [31]. Le nombre de particules est donc variable, et on serait alors confrontés au paradoxe de Klein. Mais, comme l'équation *DKP* concerne les bosons, il n'est pas possible d'introduire la mer de Dirac pour l'expliquer, et on devra utiliser pour ce faire la théorie du champ quantifié [9, 11].

La densité de courant (Cf.2.56) : $J_i = -(\Psi_i^* \Theta_i + \Psi_i \Theta_i^*) N_i^2$, est par contre continue:

$$J^i(z_0^+) = J^i(z_0^-) \quad (2.82)$$

et l'équation ci-dessus assure la conservation de la charge totale.

2.3 Solution de l'équation DKP pour le spin 0

La particule de spin 0 ne possède pas de degrés de liberté internes, et l'étude de son interaction avec le potentiel scalaire de *WS*, se fait par simple déduction de celle du spin 1, en faisant certaines correspondances. En effet, en mettant

$$\widetilde{\Phi}(z)^T = (\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4, \eta_5) \quad (2.83)$$

le système (2.22) se ramène à:

$$\begin{cases} O_{KG} \eta_1 = 0 \\ \eta_2 = \frac{E - eV}{m} \eta_1 \\ \eta_3 = 0 \\ \eta_4 = 0 \\ \eta_5 = \frac{i}{m} \frac{d\eta_1}{dz} \end{cases} \quad (2.84)$$

et les correspondances sont : $\eta_1 \longrightarrow \Psi; \eta_2 \longrightarrow \Omega; \eta_3 \longrightarrow C_3;$
 $\eta_4 \longrightarrow C_3; \eta_5 \longrightarrow \Theta$, d'où:

$$\begin{pmatrix} \eta_2 \\ \eta_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E - eV_0}{m} \\ \frac{i}{m} \frac{d}{dz} \end{pmatrix} \otimes \eta_1 \quad (2.85)$$

et

$$\eta_1(y) = A y^{-\mu} (1-y)^\nu {}_2F_1(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, y) + B y^\mu (1-y)^\nu {}_2F_1(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2, y) \quad (2.86)$$

avec

$$\phi(z)^T = (\eta_1, \eta_2, \eta_5)^T \quad (2.87)$$

désignant la solution de (2.22), qui s'écrit pour $z < 0$:

$$\begin{aligned} & \phi(z) \\ &= A y^{-\mu} (1-y)^\nu [{}_2F_1(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, y)M_1(y) + {}_2F_1(\alpha_1 + 1, \beta_1 + 1, \gamma_1 + 1, y)N_1(y)] \\ & \quad (2.88) \\ &+ B y^\mu (1-y)^\nu [{}_2F_1(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2, y)M_2(y) + {}_2F_1(\alpha_2 + 1, \beta_2 + 1, \gamma_2 + 1, y)N_2(y)] \end{aligned}$$

et pour $z > 0$:

$$\begin{aligned} & \phi(z) \\ &= C y^{-\mu} (1-y)^\nu [{}_2F_1(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, y)M'_1(y) + {}_2F_1(\alpha_1 + 1, \beta_1 + 1, \gamma_1 + 1, y)N'_1(y)] \\ & \quad (2.89) \\ &+ D y^\mu (1-y)^\nu [{}_2F_1(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2, y)M'_2(y) + {}_2F_1(\alpha_2 + 1, \beta_2 + 1, \gamma_2 + 1, y)N'_2(y)] \end{aligned}$$

avec $M_1(y), N_1(y), M_2(y), N_2(y)$ et $M'_1(y), N'_1(y), M'_2(y), N'_2(y)$ respectivement donnés par (2.45) et (2.47).

La continuité de $\phi(z)$ en $z = 0$, équivaut à celle de η_1 et η'_1 en $z = 0$, d'où:

$$\begin{cases} A K_1 + B K_2 = C K_1 + D K_2 \\ A G_1 + B G_2 = -C G_1 - D G_2 \end{cases} \quad (2.90)$$

avec K_1, K_2, G_1, G_2 donnés par (2.50). Les formes asymptotiques de $\phi(z)$ s'écrivent en mettant $D = 0$:

$$\phi(z) \xrightarrow{z \rightarrow -\infty} A e^{-ik(z+a)} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E}{m} \\ -\frac{i\mu}{rm} \end{pmatrix} + B e^{ik(z+a)} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E}{m} \\ \frac{i\mu}{rm} \end{pmatrix} \quad (2.91)$$

$$\phi(z) \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} C e^{ik(z-a)} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E}{m} \\ \frac{i\mu}{rm} \end{pmatrix} \quad (2.92)$$

La densité de courant est donnée par:

$$J = -(\eta_1^* \eta_5 + \eta_5^* \eta_1) \quad (2.93)$$

soit

$$\begin{cases} J_G = -2\frac{k}{m} [|A|^2 - |B|^2] \\ J_D = -2\frac{k}{m} |C|^2 \end{cases}$$

d'où les expressions de **R** et **T**:

$$\mathbf{R} = \frac{1}{4} |\lambda^{2\mu}|^2 \left| \frac{F_6}{F_5} + \frac{F_2}{F_1} \right|^2 \quad (2.94)$$

$$\mathbf{T} = \frac{1}{4} |\lambda^{2\mu}|^2 \left| \frac{F_6}{F_5} - \frac{F_2}{F_1} \right|^2 \quad (2.95)$$

avec $F_1, F_2, F_3, F_4, F_5, F_6$ donnés par (2.64).

Dans le cas de la barrière ($r \rightarrow 0$), les formes asymptotiques de la fonction d'onde s'écrivent:

$$\phi_0(z) = \theta(z) e^{ik(z-a)} V_{tr} + \theta(-z) [e^{-ik(z+a)} V_{ref} + e^{ik(z+a)} V_{inc}] \quad (2.96)$$

où V_{tr}, V_{ref}, V_{inc} sont donnés par (2.71). Les coefficients **R** et **T** s'écrivent:

$$\mathbf{R} = \frac{\left(\frac{k^2 - p^2}{2pk}\right)^2 \sin^2 2pa}{1 + \left(\frac{k^2 - p^2}{2pk}\right)^2 \sin^2 2pa} \quad (2.97)$$

$$\mathbf{T} = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 - p^2}{2pk}\right)^2 \sin^2 2pa} \quad (2.98)$$

et sont exactement ceux obtenus pour le spin 1.

Les conditions aux limites s'écrivent:

$$\begin{pmatrix} \eta_1(z_0^+) \\ \eta_2(z_0^+) \\ \eta_5(z_0^+) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & E - eV_2 & 0 \\ 0 & E - eV_1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1(z_0^-) \\ \eta_2(z_0^-) \\ \eta_5(z_0^-) \end{pmatrix} \quad (2.99)$$

qui, comme pour le spin 1, se répercutent sur la densité de courant ($J(z_0^+) = J(z_0^-)$), et sur la densité de charge

$\left(J^0(z_0^+) = \frac{E - eV_2}{E - eV_1} J^0(z_0^-)\right)$ élucidant ainsi le paradoxe de Klein.

Notons que pour les bosons de spin 0 dans le formalisme de FV , les coefficients de réflexion et de transmission de la barrière coïncident exactement avec ceux de l'équation de KG [39]. Par ailleurs, l'équivalence entre les équations

DKP et *KG* pour le spin 0, a déjà été établie dans la littérature [20, 21, 46], et nous la pensons établie dans notre cas, sur la base de l'analogie *FV*. En effet, dans le système d'équations (2.84), nous identifions η_1 et $\eta_2 \left(= \frac{E - eV}{m} \eta_1 \right)$ comme étant la somme et la différence de ω_1 et ω_2 , composantes de la fonction ω solution de l'équation de *FV* [31] :

$$\begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \end{pmatrix} \quad (2.100)$$

Et comme les équations de *FV* et de *KG* sont bien équivalentes, on en déduit l'équivalence -par transitivité- entre les équations *DKP* (η_1, η_2) et *KG*. Ceci n'est évidemment qu'une démonstration artificielle, car, sachant que la composante $\eta_5 \left(= \frac{i}{m} \frac{d\eta_1}{dz} \right)$, n'affecte pas le calcul des coefficients de réflexion et de transmission (Cf. Chapitre 3), nous n'avons tenu compte dans nos arguments que de η_1 et η_2 , η_2 exhibant la symétrie de charge présente dans le formalisme *DKP*.

Chapter 3

DIFFUSION DES PARTICULES DKP PAR LA BARRIERE DE POTENTIEL

3.1 Introduction

La fonction de Green -ou propagateur espace-énergie-, joue un rôle important en physique, et contient toute l'information sur le système quantique. Reliée au propagateur espace-temps par une transformation de Fourier, elle entre de façon cruciale dans la question concernant le tunnel quantique. Et dans le cas des équations unidimensionnelles de Schrödinger et de KG , on dénombre pour cette fonction, plusieurs cas analytiques. Cependant, comme il n'est pas aisé d'élaborer un Hamiltonien pour l'équation DKP , obtenir une telle expression pour cette dernière est une lourde tâche, qu'on pourrait alléger en connectant la théorie de FV [19] avec l'équivalence bien établie entre les théories de KG et DKP , dans le cas des interactions vectorielles type Lorentz [20]. Equivalence qui n'est toutefois pas établie -spécifions le- dans le cas des interactions scalaires de Lorentz, ou des interactions tensorielles. Rajoutons que le propagateur DKP pour la diffusion deuteron-nucléon ($d - A$) à des énergies intermédiaires, a été obtenu dans [37], mais que celui-ci n'est que la fonction de Green pour l'équation DKP , et ne peut être décomposé en propagations d'énergie positive et négative.

Les états de Bhabha, dont ceux de Dirac et de DKP sont des cas particuliers, opèrent dans un espace métrique indéfini. Par conséquent, toutes les transformations ne sont pas unitaires, et toutes les observables ne sont pas hermitiennes [41]. En effet, la condition d'hermiticité pour les opérateurs de Dirac, requiert que: $\mathcal{O}^+ = \mathcal{O}$, mais, comme le fit remarquer Kemmer, ceci n'est plus vrai lorsque $\mathcal{S} > \frac{1}{2}$, tel que c'est le cas pour l'algèbre DKP [45]. La condition d'hermiticité s'écrit de façon générale pour les spins demi-entiers:

$$[\eta^0 \alpha^0 \mathcal{O}]^+ = [\eta^0 \alpha^0 \mathcal{O}] \text{ pour } \mathcal{S} = n + \frac{1}{2} \quad (3.1)$$

avec η^0 étant une matrice auxiliaire définie par $\eta^0 = \gamma^0$ pour $\mathcal{S} = \frac{1}{2}$.

Et pour les spins entiers elle s'écrit:

$$\psi^+ [\eta^0 \alpha^0 \mathcal{O}]^+ \psi = \psi^+ [\eta^0 \alpha^0 \mathcal{O}] \psi \text{ pour } \mathcal{S} = n \quad (3.2)$$

avec $\eta^0 = [2(\beta^0)^2 - 1]$ pour $\mathcal{S} = 1$, i.e., $s = 0$ et 1 . Cette plus faible condition est appelée pseudo-hermiticité.

Dans l'espace métrique de Bhabha, l'état fondamental χ/\mathcal{S} des particules, possède une norme positive, le premier état excité $\chi/(\mathcal{S} - 1)$ une norme négative, la norme oscillant en aller-retour avec chaque excitation supplémentaire.

Autrement dit, pour tout état excité par la suite, la norme change avec un signe moins. Les antiparticules ont respectivement, la même norme ou la norme opposée, que les particules de spin demi-entiers ou entiers. Le cas le plus simple est celui de Dirac qui ne possède que des états de norme positive [41].

L'algèbre de Dirac n'est pas singulière, il est donc plus aisé d'élaborer un Hamiltonien pour l'équation de Dirac qui possède $2(2s + 1)$ composantes (le 2 c'est pour particule-antiparticule), que pour l'équation *DKP* dont les β^μ n'ont pas des inverses, car ayant des valeurs propres nulles (les valeurs propres de α^μ (Cf. 2.1) sont: $\mathcal{S}, \mathcal{S} - 1, \dots, -\mathcal{S} + 1, -\mathcal{S}$, dont 0 pour \mathcal{S} entier [46]), et qui possède plus que $2(2s + 1)$ composantes (pour particule-antiparticule) dans les deux cas $s = 0$ et 1. Les composantes en plus, sont appelées "*composantes subsidiaires*", pour lesquelles, Krajcik et al [42] furent les premiers à obtenir un Hamiltonien, en utilisant la formulation *ST* (Sakata et Taketani) de l'équation *DKP* [42]. Les $2(2s + 1)$ composantes sont appelées "*composantes de la particule*".

L'idée de Sakata et Taketani fût que la formulation d'un Hamiltonien pour l'équation *DKP*, pouvait se faire en deux équations distinctes, en séparant des *composantes subsidiaires*, les $2(2s + 1)$ *composantes de la particule*, en une équation d'Hamiltonien distincte. Ces dernières exhibent la nature particule-antiparticule de l'équation *DKP*, qui est révélée dans notre cas, par la densité de charge [22, 36].

Les *composantes de la particule* dans le cas du spin 0, ont elles mêmes été dérivées d'une autre manière par Feshbach et Villars, à partir de l'équation de *KG* [19]. Ils obtinrent $2(2s + 1)$ équations de la même forme que les $2(2s + 1)$ composantes *ST*. C'est la raison pour laquelle, les *composantes de la particule ST* sont souvent appelées équation de *FV* [46]. Dans ce même ordre d'idées, nous procéderons pour le calcul de la fonction de Green- *DKP*, par faire ressortir les $2(2s + 1)$ *composantes de la particule* en un Hamiltonien distinct, qui sera construit sur la base de l'analogie *FV*. Cependant, et dans un premier temps, nous obtenons d'abord l'expression du propagateur *DKP* en termes de celui de *KG*, mais comme nous serons confrontés à la difficulté d'obtenir les coefficients **R** et **T** via $G_{DKP}(E, z_f, z_i)$ [38], nous opterons alors pour l'analogie *FV* et la décomposition *ST*, et nous construirons ensuite la matrice de diffusion *S*.

3.2 Fonction de Green pour l'équation DKP

Les particules *DKP* en interaction avec un champ électromagnétique A^μ sont décrites par l'équation (2.4), qui, lorsque l'interaction est scalaire et indépendante du temps, prend la forme suivante:

$$\left(\tilde{k} - m\right) \widetilde{\phi}(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.3)$$

avec \tilde{k} défini par:

$$\tilde{k} = k_\mu \beta^\mu \quad (3.4)$$

et le quadrivecteur k_μ défini par:

$$k_\mu = (E - eV, -\mathbf{p}) \quad (3.5)$$

Pour calculer le processus de diffusion dans la théorie *DKP*, nous devons spécifier le propagateur *DKP*, qui, par analogie avec le cas non-relativiste, satisfait l'équation suivante [29]:

$$\left(\tilde{k} - m\right) G_{DKP} = 1 \quad (3.6)$$

dont la solution symbolique s'écrit :

$$G_{DKP} = \frac{1}{\tilde{k} - m} \quad (3.7)$$

Nous convenons d'écrire pour tout opérateur A et B , B inversible:

$$\frac{A}{B} = AB^{-1} \quad (3.8)$$

et nous proposons d'utiliser l'opérateur inversible \hat{O} défini par:

$$\hat{O} = \tilde{k} \left(\tilde{k} + m\right) + m^2 - k^2 \quad (3.9)$$

de sorte à pouvoir écrire:

$$G_{DKP} = \frac{\hat{O}}{\left(\tilde{k} - m\right) \hat{O}} \quad (3.10)$$

avec

$$\left(\tilde{k} - m\right) \hat{O} = \left[1 - \frac{\tilde{k}k^2 - \tilde{k}^3}{m(k^2 - m^2)} \right] m(k^2 - m^2) \quad (3.11)$$

et

$$k^2 = k_\mu k^\mu \quad (3.12)$$

On obtient finalement:

$$G_{DKP} = \frac{1}{m} \left[\tilde{k} (\tilde{k} + m) - O_{KG} \right] O_{KG}^{-1} \left[1 - \frac{1}{m} (\tilde{k} k^2 - \tilde{k}^3) O_{KG}^{-1} \right]^{-1} \quad (3.13)$$

où O_{KG} est l'opérateur de KG défini par:

$$O_{KG} = k^2 - m^2 = (E - eV)^2 + \Delta - m^2 \quad (3.14)$$

La matrice G_{DKP} est de dimension 5×5 pour $s = 0$, et 10×10 pour $s = 1$. Ceci constitue le principal résultat qui exprime la fonction de Green- DKP en termes de la fonction de Green- KG , définie par $G_{KG}(E, \mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i) = \langle \mathbf{r}_f | O_{KG}^{-1} | \mathbf{r}_i \rangle$.

Pour évaluer le terme $(\tilde{k} k^2 - \tilde{k}^3)$ dans G_{DKP} , nous utilisons les propriétés (2) des matrices β^μ . On obtient pour le spin 0 :

$$(\tilde{k} k^2 - \tilde{k}^3) = \left[\sum_{i=1}^3 p_i^2, E - eV \right] \begin{pmatrix} \sigma^+ & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} + [(E - eV)^2, p_i] \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \rho^i \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

où $\mathbf{0}$ représente la matrice nulle, ρ^i est donnée par (2.7), et σ^+ est définie par:

$$\sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

Et pour le spin 1 :

$$\begin{aligned} (\tilde{k} k^2 - \tilde{k}^3) = & \\ & \sum_{i=1}^3 \left\{ [E - eV, p_i^2] (\beta^i)^2 \beta^0 + [(E - eV)^2, p_i] (\beta^0)^2 \beta^i \right\} \\ & - \sum_{i \neq j} \left\{ (E - eV) p_i p_j (\beta^0 \beta^i \beta^j + \beta^0 \beta^j \beta^i) + p_i (E - eV) p_j \beta^i \beta^0 \beta^j \right. \\ & \left. + p_i p_j (E - eV) \beta^i \beta^j \beta^0 \right\} \end{aligned} \quad (3.17)$$

Dans ce qui suit, nous allons chercher une expression analytique pour G_{DKP} dans le cas de la barrière de potentiel (2.23) : $V(z) = V_0 \theta(a - |z|)$, qui est l'une parmi les simples modèles de potentiels réalisant la situation concrète du phénomène de création de paires de particules, lequel phénomène est intimement lié l'effet "*Tunnel de Klein*" [11, 34, 35]. Les relations (3.15) et (3.17) s'écrivent alors de façon unifiée:

$$\left(\tilde{k}k^2 - \tilde{k}^3\right) = [E - eV, p_3^2] (\beta^3)^2 \beta^0 + [(E - eV)^2, p_3] (\beta^0)^2 \beta^3 \quad (3.18)$$

En développant en série formelle, le terme $\left[1 - \frac{1}{m} \left(\tilde{k}k^2 - \tilde{k}^3\right) O_{KG}^{-1}\right]^{-1}$ dans (3.13), nous obtenons:

$$\frac{1}{1 - \frac{1}{m} \left(\tilde{k}k^2 - \tilde{k}^3\right) O_{KG}^{-1}} = 1 + \frac{1}{m} \left(\tilde{k}k^2 - \tilde{k}^3\right) O_{KG}^{-1} + \left[\frac{1}{m} \left(\tilde{k}k^2 - \tilde{k}^3\right) O_{KG}^{-1}\right]^2 + \dots \quad (3.19)$$

Sachant que:

$$\left(\tilde{k}k^2 - \tilde{k}^3\right)^2 = 0 \quad (3.20)$$

alors G_{DKP} prend la forme :

$$G_{DKP} = \frac{1}{m} \left[\tilde{k} \left(\tilde{k} + m\right) - O_{KG}\right] \left[O_{KG}^{-1} + \frac{1}{m} O_{KG}^{-1} \left(\tilde{k}k^2 - \tilde{k}^3\right) O_{KG}^{-1}\right] \quad (3.21)$$

soit, dans la base des configurations à une dimension $|z\rangle$:

$$G_{DKP}(E, z_f, z_i) =$$

$$\langle z_f | G_{DKP} | z_i \rangle = \langle z_f | A | z_i \rangle - \langle z_f | B | z_i \rangle \quad (3.22)$$

avec

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{m} \tilde{k} \left(\tilde{k} + m\right) C; B = \frac{1}{m} O_{KG} C \\ C &= O_{KG}^{-1} + \frac{1}{m} [O_{KG}^{-1}, eV] (\beta^3)^2 \beta^0 - \frac{i}{m} \left[\frac{d}{dz}, O_{KG}^{-1}\right] (\beta^0)^2 \beta^3 \end{aligned} \quad (3.23)$$

Le terme $\langle z_f | O_{KG}^{-1} | z_i \rangle$ représentant la fonction de Green- KG et qui apparaît dans (3.22) est donné par (1.189). Nous faisons alors le changement de variables $z \rightarrow \frac{z+a}{2a}$ avec $a = \frac{1}{2}$ (Cf. **1.5.5**), afin de déplacer la barrière (2.23) de l'intervalle $[-a, +a]$ à l'intervalle $[0, 1]$, en lui donnant ainsi la forme:

$V(z) = V_0 \theta(z) \theta(1-z)$. Nous obtenons:

$$\begin{aligned} \langle z_f | A | z_i \rangle &= \frac{1}{m} \left[\tilde{k} \left(\tilde{k} + m\right)\right]_{z_f} \left[1 + \frac{1}{m} [eV(z_i) - eV(z_f)] (\beta^3)^2 \beta^0\right. \\ &\quad \left. - \frac{i}{m} \left(\frac{d}{dz_f} + \frac{d}{dz_i}\right) (\beta^0)^2 \beta^3\right] G_{KG}(E, z_f, z_i) \end{aligned} \quad (3.24)$$

et

$$\begin{aligned} \langle z_f | B | z_i \rangle &= \left[\frac{1}{m} + \frac{1}{m^2} eV(z_i) (\beta^3)^2 \beta^0 \right] \delta(z_f - z_i) + \frac{i}{m^2} (\beta^0)^2 \beta^3 \delta'(z_f - z_i) \\ &\quad - \frac{1}{m^2} O_{KG}(z_f) \left[(\beta^3)^2 \beta^0 eV(z_f) - (\beta^0)^2 \beta^3 \frac{d}{dz_f} \right] G_{KG}(E, z_f, z_i) \end{aligned} \quad (3.25)$$

avec

$$\delta'(z_f - z_i) = \frac{d}{dz_f} \delta(z_f - z_i) \quad (3.26)$$

et

$$\begin{aligned} & \left[\tilde{k} (\tilde{k} + m) \right]_{z_f} = \\ & \left[(\beta^3)^2 + (\beta^0)^2 \right] [E - eV(z_f)]^2 - (\beta^3)^2 [O_{KG}(z_f) + m^2] + m\beta^0 [E - eV(z_f)] \\ & + i [\beta^0 (E - eV(z_f)) + m] \beta^3 \frac{d}{dz_f} + i\beta^3 \beta^0 \frac{d}{dz_f} [E - eV(z_f)] \end{aligned} \quad (3.27)$$

soit finalement:

$$G_{DKP}(E, z_f, z_i) =$$

$$\begin{aligned}
& \left\{ \frac{1}{m} [E - eV(z_f)]^2 (\beta^0)^2 + [E - eV(z_f)] \beta^0 \right. \\
& + \frac{1}{m^2} \left[[E - eV(z_f)]^2 - m^2 \right] (\beta^3)^2 \beta^0 eV(z_f) \\
& + \frac{1}{m^2} [E - eV(z_f)]^2 [eV(z_i) - eV(z_f)] (\beta^0)^2 (\beta^3)^2 \beta^0 \\
& \left. + \frac{1}{m} [E - eV(z_f)] [eV(z_i) - eV(z_f)] \beta^0 (\beta^3)^2 \beta^0 \right\} G_{KG}(E, z_f, z_i) \\
& + \left\{ \frac{i}{m} [E - eV(z_f)] [\beta^0 \beta^3 + \beta^3 \beta^0] + i \beta^3 - \frac{i}{m} [eV(z_i) - eV(z_f)] \beta^3 \beta^0 \right. \\
& - \frac{i}{m^2} [E - eV(z_f)]^2 (\beta^0)^2 \beta^3 - \frac{i}{m} [E - eV(z_f)] \beta^0 \beta^3 \\
& \left. - \frac{1}{m^2} \left[[E - eV(z_f)]^2 - m^2 \right] (\beta^0)^2 \beta^3 \right\} \frac{d}{dz_f} G_{KG}(E, z_f, z_i) \\
& + \left\{ -\frac{i}{m^2} [E - eV(z_f)]^2 (\beta^0)^2 \beta^3 - \frac{i}{m} [E - eV(z_f)] \beta^0 \beta^3 \right\} \frac{d}{dz_i} G_{KG}(E, z_f, z_i) \\
& + \left\{ -\frac{1}{m} (\beta^3)^2 + \frac{1}{m^2} [eV(z_i) - eV(z_f)] (\beta^3)^2 \beta^0 + \frac{1}{m} \beta^3 (\beta^0)^2 \beta^3 \right. \\
& \left. - \frac{1}{m^2} (\beta^3)^2 \beta^0 eV(z_f) \right\} \frac{d^2}{dz_f^2} G_{KG}(E, z_f, z_i) + \\
& + \left\{ \frac{i}{m^2} (\beta^3)^2 (\beta^0)^2 \beta^3 - \frac{1}{m^2} (\beta^0)^2 \beta^3 \right\} \frac{d^3}{dz_f^3} G_{KG}(E, z_f, z_i) \\
& + \frac{1}{m} \beta^3 (\beta^0)^2 \beta^3 \frac{d}{dz_f} \frac{d}{dz_i} G_{KG}(E, z_f, z_i) \\
& + \frac{i}{m^2} (\beta^3)^2 (\beta^0)^2 \beta^3 \frac{d^2}{dz_f^2} \frac{d}{dz_i} G_{KG}(E, z_f, z_i) \\
& - \left[\frac{1}{m} + \frac{1}{m^2} eV(z_i) (\beta^3)^2 \beta^0 \right] \delta(z_f - z_i) - \frac{i}{m^2} (\beta^0)^2 \beta^3 \delta'(z_f - z_i)
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Le calcul des coefficients de réflexion \mathbf{R} et de transmission \mathbf{T} , via le résultat ci-dessus de $G_{DKP}(E, z_f, z_i)$, s'avère être difficile, voire impossible, car tout comme en [37], $G_{DKP}(E, z_f, z_i)$ ne peut être décomposée en propagations d'énergie positive et négative. Ceci est dû à la singularité des matrices β^μ , et aux *composantes subsidiaires*, responsables de l'apparition du terme $\delta'(z_f - z_i)$ et des termes dérivés de $G_{KG}(E, z_f, z_i)$. On se propose alors, d'exploiter la

symétrie de charge type FV existant dans le problème [31], et révélée par les $2(2s + 1)$ composantes de la particule.

3.3 Fonction de Green-DKP et analogie FV , spin 1

Dans cette partie, nous allons calculer le processus de diffusion pour la particule vectorielle DKP qui interagit avec la barrière de potentiel (2.23), en exploitant la décomposition ST pour séparer les $2(2s + 1)$ composantes de la particule (Ψ et Ω) en un Hamiltonien distincte. Cet Hamiltonien sera construit sur la base de l'analogie FV , du fait que Ψ et Ω qui expriment la symétrie de charge existant dans le problème, jouent un rôle similaire à celui de la somme et de la différence de ξ_1 et ξ_2 , composantes de la fonction d'onde ξ de l'équation de FV (Cf.1.153,1.154). On pose $\omega^T = (\Psi, \Omega)$, et on écrit:

$$\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} \Psi \\ \Omega \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

avec

$$B = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{-1}{2} \end{pmatrix} \otimes I_3 \quad (3.30)$$

d'où

$$i \frac{\partial}{\partial t} \omega = H \omega \quad (3.31)$$

avec l'Hamiltonien H défini par:

$$\begin{aligned} H &= B^{-1} H_{FV} B \\ &= -\frac{1}{2m} (\tau'_1 - i\tau'_2) \frac{d^2}{dz^2} + m\tau'_1 + eV \end{aligned} \quad (3.32)$$

où H_{FV} s'obtient à partir de (1.164) en remplaçant les matrices de Pauli $\tau_i, i = 1, 2, 3$ par $\tau'_i = \tau_i \otimes I_3$. Le propagateur G_{DKP} associé à H s'écrit:

$$\begin{aligned} G_{DKP} &= (E - H)^{-1} \\ &= B G_{FV} B^{-1} \end{aligned} \quad (3.33)$$

soit, dans la base des configurations $|z\rangle$:

$$\begin{aligned} G_{DKP}(E, z_f, z_i) &= \langle z_f | G_{DKP} | z_i \rangle \\ &= -iG_{KG}(E, z_f, z_i) \tau'(E, z_f, z_i) - \frac{1}{2m} (\tau'_1 - i\tau'_2) \delta(z_f - z_i) \end{aligned} \quad (3.34)$$

avec

$$\begin{aligned} \tau'(E, z_f, z_i) &= \frac{1}{2m} [E^2 - eV(z_f) + e^2V(z_f)V(z_i)] (\tau'_1 - i\tau'_2) \\ &+ \frac{1}{2} [E - eV(z_f)] (1 - \tau'_3) + \frac{1}{2} [E - eV(z_i)] (1 + \tau'_3) + \frac{m}{2} (\tau'_1 + i\tau'_2) \end{aligned} \quad (3.35)$$

La fonction de Green $G_{DKP}(E, z_f, z_i)$ s'écrit sous forme d'une somme de deux contributions: l'une régulière $G_{KG}(E, z_f, z_i)$, multipliée par la matrice dépendant du potentiel

$\tau'(E, z_f, z_i)$, et l'autre singulière $\delta(z_f - z_i)$, multipliée par la matrice nilpotente $(\tau'_3 + i\tau'_2)$.

La partie régulière peut être considérée comme semi-relativiste, car elle contient la théorie de Schrödinger et est contenue dans la théorie de KG . Cependant, la partie singulière est purement relativiste, et son rôle pourrait être interprété comme celui d'une source qui accroît l'action du potentiel $V(z)$ [39, 40], en faisant apparaître dans la théorie, le terme $V(z_f)V(z_i)$.

Comme $G_{KG}(E, z_f, z_i)$ est donnée par (1.189), nous travaillerons avec la barrière (1.110) : $V(z) = V_0\theta(z)\theta(1-z)$ en faisant le changement de variables $z \rightarrow \frac{z+a}{2a}$ (avec $a = \frac{1}{2}$).

Déterminer les coefficients de réflexion et de transmission via la fonction de Green, nous amène à étudier le comportement asymptotique de celle-ci au voisinage de l' ∞ . Ainsi donc, en considérant les limites $z_f, z_i \rightarrow \pm\infty$ (avec le même signe pour z_f et z_i), nous obtenons:

$$\begin{aligned} G_{DKP}^{\bar{+}\bar{+}}(E, z_f, z_i) &= -\frac{1}{2m} (\tau'_1 - i\tau'_2) \delta(z_f - z_i) \\ &+ \tau'(E, E, z_f, z_i) \frac{1}{2i\sqrt{E^2 - m^2}} \left[e^{ip|z_f - z_i|} + e^{-ip} \frac{i(\beta - p) \sin \rho}{\rho \cos \rho - i\beta \sin \rho} e^{\mp ip(z_f + z_i)} \right] \end{aligned} \quad (3.36)$$

avec β et ρ donnés dans (1.192), et

$$\tau'(E, E_k, z_f, z_i) = E + \frac{E_k^2}{2m} (\tau'_1 - i\tau'_2) + \frac{m}{2} (\tau'_1 + i\tau'_2) \quad (3.37)$$

Et lorsque $z_f \rightarrow \pm\infty$ et $z_i \rightarrow \mp\infty$:

$$G_{DKP}^{\mp\pm}(E, z_f, z_i) = \tau'(E, E, z_f, z_i) \frac{1}{2i\sqrt{E^2 - m^2}} \left[e^{-ip} \frac{\rho}{\rho \cos \rho - i\beta \sin \rho} e^{ip|z_f - z_i|} \right] \quad (3.38)$$

3. DIFFUSION DES PARTICULES DKP PAR LA BARRIÈRE DE POTENTIEL 73

La fonction de Green associée à l'Hamiltonien (3.32), peut aussi s'obtenir en sommant les états de diffusion avec les énergies correspondantes [17]. On écrit:

$$\begin{aligned} G_{DKP}(E, z_f, z_i) &= G_{DKP}^{bs}(E, z_f, z_i) + G_{DKP}^{ss}(E, z_f, z_i) \\ &= \sum_{n, \sigma} \frac{\omega_n^\sigma(z_f) \overline{\omega_n^\sigma(z_i)}}{E - \sigma E_n} + \sum_{\sigma} \sigma \int_0^\infty dk \frac{\omega_k^\sigma(z_f) \overline{\omega_k^\sigma(z_i)}}{E - \sigma E_k}, \sigma = \pm 1 \end{aligned} \quad (3.39)$$

où $\omega_n(z)$ et $\omega_k^\sigma(z)$ sont les états liés et les états de diffusion, avec les énergies respectives $\pm E_n$ et $\pm \sqrt{k^2 + m^2}$. $\sigma = +1$ correspond aux particules d'énergie positive, et $\sigma = -1$ aux antiparticules d'énergie négative. On assume qu'il n'y a pas d'états liés pour $V(z)$, et on met $G_{DKP}^{bs} = 0$ [17]. Remarquons que dans le cas des particules scalaires de KG , le puits de potentiel de WS est capable lorsqu'on lui fait varier les paramètres a, r et V_0 , de créer des états liés d'antiparticules, et lorsque pour une certaine valeur de V_0 appelée valeur critique V_{cr} , un état lié d'antiparticule apparaît, il rejoint l'état lié de la particule pour former un état de norme nulle, et ensuite tous deux disparaissent du spectre des états liés [28]. On écrit:

$$\omega_k^\sigma(z_f) \overline{\omega_k^\sigma(z_i)} = \sum_{j=1}^3 \omega_{k_j}^\sigma(z_f) \overline{\omega_{k_j}^\sigma(z_i)} \quad (3.40)$$

avec

$$\overline{\omega_k^\sigma(z)} = \frac{1}{2} \omega_k^\sigma(z)^+ \tau_1' \quad (3.41)$$

d'où la norme (ou pseudo-norme):

$$\langle \omega_k^\sigma \left| \frac{1}{2} \tau_1' \right| \omega_k^\sigma \rangle = \pm 1 \quad (3.42)$$

L'état de la particule possède une norme positive, et celui de l'antiparticule une norme négative. La résolution standard de cette norme négative est d'adopter la stratégie de Pauli-Weisskopf en disant qu'elle correspond à une densité de charge négative. Mais une telle résolution n'est plus possible lorsque le spin entier \mathcal{S} est supérieur à 1, puisque le premier état excité $\chi/(\mathcal{S} - 1)$ de la particule possède nécessairement une norme opposée à celle de l'état fondamental χ/\mathcal{S} , oscillant dans les deux sens avec chaque autre excitation, avec un signe moins ajouté pour la normalisation de l'antiparticule [43].

Les états de diffusion $\omega_{k_j}^\sigma$ sont des ondes planes, arrivant de gauche (+) et

de droite (-) :

$$\omega_{kj}^{\sigma(\pm)}(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} e^{\pm i\sigma kz} U_k^\sigma \otimes \mathbf{V}_j + R_{\sigma(\pm)}(k) e^{\mp i\sigma kz} U_k^\sigma \otimes \mathbf{V}_j & \begin{cases} z \ll 0 \text{ pour } (+) \\ z \gg 1 \text{ pour } (-) \end{cases} \\ T(k) e^{\pm i\sigma kz} U_k^\sigma \otimes \mathbf{V}_j & \begin{cases} z \gg 1 \text{ pour } (+) \\ z \ll 0 \text{ pour } (-) \end{cases} \end{cases} \quad (3.43)$$

On écrit $T(k)$ au lieu de $T_{\sigma(\pm)}$ du fait que $T_+ = T_- = T$ [17]. Les vecteurs \mathbf{V}_j sont reliés aux trois directions j du spin 1 : $\mathbf{V}_1^T = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 0, 0\right)$; $\mathbf{V}_2^T = \left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right)$; $\mathbf{V}_3^T = \left(0, 0, \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$, et U_k^σ est le vecteur isocharge [39, 40] défini par:

$$U_k^\sigma = \frac{1}{(mE_k)^{1/2}} \begin{pmatrix} m \\ \sigma E_k \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

En utilisant les identités suivantes [17] :

$$\begin{aligned} R_\pm^*(k) &= R_\pm(-k) \\ T^*(k) &= T(-k) \\ R_\pm^*(k) T(k) + R_\mp(k) T^*(k) &= 0 \\ |R_\pm|^2 + |T|^2 &= 1 \end{aligned} \quad (3.45)$$

et en sachant que pour toute fonction $f(x)$ intégrable sur \mathbb{R} , on peut écrire:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) = \int_0^\infty dx f(x) + \int_0^\infty dx f(-x) \quad (3.46)$$

nous analysons les possibilités suivantes:

$$\begin{aligned} (--) & \text{ pour } z_i, z_f \ll 0 \\ (-+) & \text{ pour } z_i \ll 0 \text{ et } z_f \gg 1 \\ (+-) & \text{ pour } z_i \gg 1 \text{ et } z_f \ll 0 \\ (++) & \text{ pour } z_i, z_f \gg 1 \end{aligned}$$

et nous écrivons alors les formes asymptotiques pour $G_{DKP}(E, z_f, z_i)$ comme suit:

$$\begin{aligned}
 & G_{DKP}^{+-} (E, z_f, z_i) = \\
 & \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{E^2 - E_k^2} \left[e^{ik(z_f - z_i)} + R_{\pm}(k) e^{\mp ik(z_f + z_i)} \right] \tau' (E, E_k, z_f, z_i) \\
 & - \frac{1}{4\pi m} (\tau'_1 - i\tau'_2) \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left[e^{ik(z_f - z_i)} + R_{\pm}(k) e^{\mp ik(z_f + z_i)} \right] \quad (3.47)
 \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
 & G_{DKP}^{\mp\pm} (E, z_f, z_i) = \\
 & \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{E^2 - E_k^2} \left[T(k) e^{\pm ik(z_f - z_i)} \right] \tau' (E, E_k, z_f, z_i) \\
 & - \frac{1}{4\pi m} (\tau'_1 - i\tau'_2) \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left[T(k) e^{\pm ik(z_f - z_i)} \right] \quad (3.48)
 \end{aligned}$$

Afin d'évaluer la première intégrale dans (3.47) et (3.48), nous utilisons le théorème des résidus:

$$\frac{1}{2\pi i} \oint dk \frac{F(k)}{Q(k)} = \frac{F(p)}{Q'(p)} \quad (3.49)$$

pour F et Q polynômes, p racine de Q , et Q' dérivée de Q .

Concernant la deuxième intégrale dans (3.47), pour le terme en $e^{ik(z_f - z_i)}$ nous considérons un contour le long de l'axe des réels, fermé par un demi-cercle infini dans le demi-plan complexe haut (si $(z_f - z_i) > 0$), ou bas (si $(z_f - z_i) < 0$), d'où:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ik(z_f - z_i)} = 2\pi \delta(z_f - z_i) \quad (3.50)$$

et pour le terme en $R_{\pm}(k) e^{\mp ik(z_f + z_i)}$ nous prenons un contour le long de l'axe des réels, fermé par le demi-cercle infini dans le demi-plan complexe haut, d'où:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk R_{\pm}(k) e^{\mp ik(z_f + z_i)} = 0 \quad (3.51)$$

Pour la deuxième intégrale dans (3.48), nous considérons le demi-plan complexe haut, d'où:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk T(k) e^{\pm ik(z_f - z_i)} = 0 \quad (3.52)$$

Finalement, nous obtenons:

$$G_{DKP}^{+-} (E, z_f, z_i) = -\frac{1}{2m} (\tau'_1 - i\tau'_2) \delta(z_f - z_i)$$

$$+\tau'(E, E, z_f, z_i) \frac{1}{2i\sqrt{E^2 - m^2}} \left(e^{ip|z_f - z_i|} + R_{\pm}(p) e^{\mp ip(z_f + z_i)} \right) \quad (3.53)$$

et

$$G_{DKP}^{\mp\pm}(E, z_f, z_i) = \tau'(E, E, z_f, z_i) \frac{1}{2i\sqrt{E^2 - m^2}} T(p) e^{ip|z_f - z_i|} \quad (3.54)$$

En comparant (3.36) avec (3.53) et (3.38) avec (3.54), nous déduisons:

$$\begin{aligned} R_{\pm}(p) &= e^{-ip} \frac{i(\beta - p) \sin \rho}{\rho \cos \rho - i\beta \sin \rho} \\ T(p) &= e^{-ip} \frac{\rho}{\rho \cos \rho - i\beta \sin \rho} \end{aligned} \quad (3.55)$$

d'où les coefficients de réflexion \mathbf{R} et de transmission \mathbf{T} , qui s'écrivent:

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= |R_{\pm}(p)|^2 \\ &= \frac{(\beta - p)^2 \sin^2 \rho}{\rho^2 \cos^2 \rho + \beta^2 \sin^2 \rho} \end{aligned} \quad (3.56)$$

et

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= |T(p)|^2 \\ &= \frac{\rho^2}{\rho^2 \cos^2 \rho + \beta^2 \sin^2 \rho} \end{aligned} \quad (3.57)$$

Ces coefficients coïncident exactement avec (2.74) et (2.75) pour $a = \frac{1}{2}$. Force est de souligner, que nous les avons obtenus en utilisant uniquement les *composantes de la particule*. Les *composantes subsidiaires* ($\Theta = \frac{i}{m} \frac{d}{dz} \Psi$) n'affectant pas les calculs, ceci justifie notre choix de départ de ne pas en tenir compte, et de recourir à la décomposition ST pour l'élaboration d'un Hamiltonien pour l'équation DKP .

3.4 Fonction de Green-DKP et analogie FV , spin 0

La fonction de Green pour la particule de spin 0 [38], peut s'obtenir par simple déduction à partir de celle de la particule de spin 1. En effet, en faisant les correspondances entre les composantes qui expriment la symétrie de charge de la particule vectorielle, et celles de la particule scalaire, c'est-à-dire:

$\Psi \rightarrow \eta_1, \Omega \rightarrow \eta_2$, on obtient des expressions similaires, où la seule différence réside dans les dimensions des vecteurs et matrices, à partir du moment où il n'y a pas pour la particule de spin 0, les trois directions j que l'on retrouve pour

celle de spin 1. Les matrices τ'_i seront remplacées par les matrices de Pauli elles mêmes, et l'Hamiltonien H s'écrira:

$$H = -\frac{1}{2m} (\tau_1 - i\tau_2) \frac{d^2}{dz^2} + m\tau_1 + eV \quad (3.58)$$

La fonction de Green s'écrit:

$$\begin{aligned} & G_{DKP}(E, z_f, z_i) \\ &= -iG_{KG}(E, z_f, z_i) \tau(E, z_f, z_i) - \frac{1}{2m} (\tau_1 - i\tau_2) \delta(z_f - z_i) \end{aligned} \quad (3.59)$$

avec

$$\begin{aligned} \tau(E, z_f, z_i) &= \frac{1}{2m} [E^2 - eV(z_f) + e^2V(z_f)V(z_i)] (\tau_1 - i\tau_2) \\ &+ \frac{1}{2} [E - eV(z_f)] (1 - \tau_3) + \frac{1}{2} [E - eV(z_i)] (1 + \tau_3) + \frac{m}{2} (\tau_1 + i\tau_2) \end{aligned} \quad (3.60)$$

d'où, au voisinage de l'infini :

$$\begin{aligned} G_{DKP}^{++}(E, z_f, z_i) &= -\frac{1}{2m} (\tau_1 - i\tau_2) \delta(z_f - z_i) \\ &+ \tau(E, E, z_f, z_i) \frac{1}{2i\sqrt{E^2 - m^2}} \left[e^{ip|z_f - z_i|} + e^{-ip} \frac{i(\beta - p) \sin \rho}{\rho \cos \rho - i\beta \sin \rho} e^{\mp ip(z_f + z_i)} \right] \end{aligned} \quad (3.61)$$

et

$$G_{DKP}^{\mp\pm}(E, z_f, z_i) = \tau(E, E, z_f, z_i) \frac{1}{2i\sqrt{E^2 - m^2}} \left[e^{-ip} \frac{\rho}{\rho \cos \rho - i\beta \sin \rho} e^{ip|z_f - z_i|} \right] \quad (3.62)$$

avec

$$\tau(E, E_k, z_f, z_i) = E + \frac{E_k^2}{2m} (\tau_1 - i\tau_2) + \frac{m}{2} (\tau_1 + i\tau_2) \quad (3.63)$$

Les états de diffusion $\omega_k^\sigma(z)$ s'écrivent:

$$\omega_k^{\sigma(\pm)}(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} e^{\pm i\sigma z} U_k^\sigma + R_{\sigma(\pm)}(k) e^{\mp i\sigma z} U_k^\sigma & \begin{cases} z \ll 0 \text{ pour } (+) \\ z \gg 1 \text{ pour } (-) \end{cases} \\ T(k) e^{\pm i\sigma z} & \begin{cases} z \gg 1 \text{ pour } (+) \\ z \ll 0 \text{ pour } (-) \end{cases} \end{cases} \quad (3.64)$$

avec

$$\overline{\omega_k^\sigma(z)} = \frac{1}{2} \omega_k^\sigma(z)^+ \tau_1 \quad (3.65)$$

et la pseudo-norme:

$$\langle \omega_k^\sigma \left| \frac{1}{2} \tau_1 \right| \omega_k^\sigma \rangle = \pm 1 \quad (3.66)$$

La fonction de Green que l'on obtient en sommant les états de diffusion avec les énergies correspondantes [17], s'écrit au voisinage de l' ∞ :

$$G_{DKP}^{\bar{+}\bar{+}}(E, z_f, z_i) = -\frac{1}{2m} (\tau_1 - i\tau_2) \delta(z_f - z_i) + \tau(E, E, z_f, z_i) \frac{1}{2i\sqrt{E^2 - m^2}} \left(e^{ip|z_f - z_i|} + R_\pm(p) e^{\mp ip(z_f + z_i)} \right) \quad (3.67)$$

et

$$G_{DKP}^{\mp\pm}(E, z_f, z_i) = \tau(E, E, z_f, z_i) \frac{1}{2i\sqrt{E^2 - m^2}} T(p) e^{ip|z_f - z_i|} \quad (3.68)$$

En comparant (3.61) avec (3.67) et (3.62) avec (3.68), nous obtenons les coefficients de réflexion et de transmission

$$\mathbf{R} = \frac{(\beta - p)^2 \sin^2 \rho}{\rho^2 \cos^2 \rho + \beta^2 \sin^2 \rho} \quad (3.69)$$

$$\mathbf{T} = \frac{\rho^2}{\rho^2 \cos^2 \rho + \beta^2 \sin^2 \rho}$$

qui sont exactement ceux obtenus pour le spin 1 [22, 36], et aussi, ceux obtenus pour la particule FV de spin 0 (Cf.1.195, 1.196). Ceci n'est pas surprenant, vu que H_{DKP} découle de H_{FV} .

3.5 Matrice de diffusion, spin 1

Lorsqu'une onde représentant une particule est incidente sur un potentiel, elle est partiellement transmise et partiellement réfléchi. Les formes asymptotiques des fonctions d'onde peuvent être déterminées à un temps très long après l'interaction, et donc par le biais de la matrice de diffusion S .

Notre particule DKP est sujette à la barrière de potentiel (2.23). Lorsque $|z| \rightarrow \infty, V(z) \rightarrow 0$ assez rapidement de sorte à ce que la fonction d'onde $\phi(z)$ solution de (2.22), devienne celle d'une particule libre. Dans ce qui suit, nous examinerons le problème de transmission-réflexion, dans lequel la particule est incidente, en venant de la gauche (de $-\infty$), ou de la droite (de $+\infty$). Les formes asymptotiques de la fonction d'onde $\phi(z)$ s'écrivent comme suit (Cf. 2.52, 2.53):

$$\phi_{\pm}(z) = \begin{cases} e^{\pm ik(z+a)}M \otimes \mathbf{V} + e^{\mp ik(z+a)}N' \otimes \mathbf{V} & \begin{cases} z \rightarrow -\infty \text{ pour } (+) \\ z \rightarrow +\infty \text{ pour } (-) \end{cases} \\ e^{\pm ik(z-a)}M' \otimes \mathbf{V} + e^{\mp ik(z-a)}N \otimes \mathbf{V} & \begin{cases} z \rightarrow +\infty \text{ pour } (+) \\ z \rightarrow -\infty \text{ pour } (-) \end{cases} \end{cases} \quad (3.70)$$

soit, en écrivant distinctement la partie entrante (*incoming*), et la partie sortante (*outgoing*) de la fonction d'onde:

$$\begin{cases} \phi_{\pm}^{in}(z) = \theta(-z) e^{\pm ik(z+a)}M \otimes \mathbf{V} + \theta(z) e^{\mp ik(z-a)}N \otimes \mathbf{V} \\ \phi_{\pm}^{out}(z) = \theta(z) e^{\pm ik(z-a)}M' \otimes \mathbf{V} + \theta(-z) e^{\mp ik(z+a)}N' \otimes \mathbf{V} \end{cases} \quad (3.71)$$

avec

$$M = \begin{pmatrix} B \\ B \frac{E}{m} \\ -B \frac{k}{m} \end{pmatrix}; M' = \begin{pmatrix} C \\ C \frac{E}{m} \\ -C \frac{k}{m} \end{pmatrix}; N = \begin{pmatrix} D \\ D \frac{E}{m} \\ D \frac{k}{m} \end{pmatrix}; N' = \begin{pmatrix} A \\ A \frac{E}{m} \\ A \frac{k}{m} \end{pmatrix} \quad (3.72)$$

le suffixe \pm se rapportant à la situation où l'onde est incidente de $\mp\infty$, et $\theta(z)$ est la fonction d'Heaviside (Cf. 1.70)

La matrice S reliant $\phi_{\pm}^{in}(z)$ à $\phi_{\pm}^{out}(z)$ s'écrit:

$$\begin{pmatrix} M' \\ N' \end{pmatrix} \otimes \mathbf{V} = \begin{pmatrix} S_{aa} & S_{ab} \\ S_{ba} & S_{bb} \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} M \\ N \end{pmatrix} \otimes \mathbf{V} \right] \quad (3.73)$$

où $S_{aa}, S_{ba}, S_{ab}, S_{bb}$ sont des blocs de matrices de dimension 9×9 . Appliquée aux deux cas particuliers $(M, N) = (\mathbf{0}, \mathbf{1})$ et $(M, N) = (\mathbf{1}, \mathbf{0})$, avec $\mathbf{1}^T = (1, 1, 1)$ et $\mathbf{0}^T = (0, 0, 0)$, la relation ci-dessus nous donne:

$$S = \begin{pmatrix} T_+ & R_- \\ R_+ & T_- \end{pmatrix} \otimes I_9 \quad (3.74)$$

On définit la pseudo-unitarité de S par [38] :

$$S\bar{S} = \bar{S}S = \bar{I}_{18} \quad (3.75)$$

avec

$$\bar{S} = \left(I_2 \otimes \widetilde{\beta}^0 \right) S^+ \left(I_2 \otimes \widetilde{\beta}^0 \right) \quad (3.76)$$

et

$$\widetilde{\beta}^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}; \bar{I}_{18} = \left(I_2 \otimes \widetilde{\beta}^0 \right)^2 \quad (3.77)$$

où $\mathbf{1}$ et $\mathbf{0}$ sont respectivement les matrices unitaire et nulle de dimension (3×3) . Ceci nous donne:

$$\begin{cases} |R_{\pm}|^2 + |T_{\pm}|^2 = 1 \\ T_{\pm}^* R_{\mp} + R_{\pm}^* T_{\mp} = 0 \end{cases} \quad (3.78)$$

d'où:

$$\begin{cases} |T_+| = |T_-| \\ |R_+| = |R_-| \end{cases} \quad (3.79)$$

Le potentiel $V(z)$ est réel et pair, par conséquent $\phi^*(-z)$ est aussi solution de (2.22), d'où:

$$SS^* = S^*S = 1 \quad (3.80)$$

soit:

$$\begin{cases} R_+ = R_- \\ T_+ = T_- \end{cases} \quad (3.81)$$

Finalement S prend la forme:

$$S = \begin{pmatrix} T & R \\ R & T \end{pmatrix} \otimes I_9 \quad (3.82)$$

Les coefficients de réflexion et de transmission, sont obtenus en posant $D = 0$ dans (3.70):

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= |R|^2 = \left| \frac{A}{B} \right|^2 \\ \mathbf{T} &= |T|^2 = \left| \frac{C}{B} \right|^2 \end{aligned} \quad (3.83)$$

3.6 Matrice de diffusion, spin 0

Obtenir la matrice de diffusion S pour la particule scalaire [38], peut se faire par simple déduction à partir de celle de la particule vectorielle. Par conséquent, S , au lieu d'être de dimension 18×18 , sera seulement de dimension 6×6 , puisque nous enlevons le produit tensoriel $(\otimes \mathbf{V})$, partout où il apparaît dans les relations du spin 1, étant donné que la particule de spin 0 est scalaire, non pas vectorielle.

Les formes asymptotiques de la fonction d'onde $\phi(z)$ s'écrivent :

$$\phi_{\pm}(z) = \begin{cases} e^{\pm ik(z+a)}M + e^{\mp ik(z+a)}N' & \begin{cases} z \rightarrow -\infty \text{ pour } (+) \\ z \rightarrow +\infty \text{ pour } (-) \end{cases} \\ e^{\pm ik(z-a)}M' + e^{\mp ik(z-a)}N & \begin{cases} z \rightarrow +\infty \text{ pour } (+) \\ z \rightarrow -\infty \text{ pour } (-) \end{cases} \end{cases} \quad (3.84)$$

et la pseudo-unitarité de S s'écrit [38] :

$$\overline{S}S = \overline{S}S = \overline{I}_6 \quad (3.85)$$

avec

$$\overline{S} = \left(I_2 \otimes \widetilde{\beta}^0 \right) S^+ \left(I_2 \otimes \widetilde{\beta}^0 \right) \quad (3.86)$$

et

$$\widetilde{\beta}^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \overline{I}_6 = \left(I_2 \otimes \widetilde{\beta}^0 \right)^2 \quad (3.87)$$

Finalement S s'écrit:

$$S = \begin{pmatrix} T & R \\ R & T \end{pmatrix} \otimes I_3 \quad (3.88)$$

Remarquons qu'en faisant la parallèle avec les résultats obtenus pour la particule de spin 0 dans le formalisme de FV , nous noterons une certaine similitude: dans le cas FV , le spineur adjoint se définit par (Cf. 1.138) :

$\overline{\Psi} = \Psi^+ \tau_3$, et \overline{S} s'écrit (Cf. 1.170): $\overline{S} = (I_2 \otimes \tau_3) S^+ (I_2 \otimes \tau_3)$, et dans le cas DKP , le spineur adjoint vérifie (Cf. 2.12) : $\overline{\phi} \beta^0 = \phi^+ \beta^0$, et \overline{S} s'écrit: $\overline{S} = \left(I_2 \otimes \widetilde{\beta}^0 \right) S^+ \left(I_2 \otimes \widetilde{\beta}^0 \right)$. Et si l'on considère uniquement les deux premières composantes de M, M', N et N' , alors S devient de dimension 4×4 comme dans le cas FV [16].

Chapter 4

CONDITIONS AUX LIMITES POUR LA PARTICULE DKP DANS LA BOITE UNIDIMENSIONNELLE

4.1 Introduction

Les axiomes de la théorie quantique furent construits afin d'expliquer la quantification de l'énergie dans les atomes et les molécules, pour lesquels, les fonctions d'onde électroniques sont étudiées, en faisant l'analogie avec la particule dans une boîte unidimensionnelle. Sachant que pour obtenir une quantification, ce n'est pas tant le type d'équation différentielle qui doit être résolu, mais surtout les conditions aux limites (*BCs*) qui doivent être obéies par cette solution.

Pour définir correctement un Hamiltonien, hormis l'expression formelle de celui-ci comme opérateur différentiel, son domaine et en particulier les *BCs*, doivent être spécifiés. Rappelons que par la modification des *BCs*, on modifie l'opérateur lui-même, sans modifier son expression formelle -sans parler du risque de perdre la propriété d'hermiticité-. Par exemple, dans l'effet d'Aharonov-Bohm, en choisissant différentes *BCs* qui préservent l'hermiticité, on obtient différentes sections efficaces [47].

En *MQNR*, l'annulation de la composante normale du courant est une condition suffisante pour obtenir une surface limite impénétrable, et ceci peut être accompli en imposant la *BC* de Dirichlet, ou de Neumann, ou des *BCs* mixtes, sur la fonction d'onde. La *BC* la plus simple avec laquelle l'Hamiltonien libre de Schrödinger est un opérateur self-adjoint bien défini, étant celle de Dirichlet ($\psi = 0$). Ceci n'est pas le cas en *MQR*. En effet, imposer la condition de Dirichlet aux limites, pour la particule libre de Dirac dans une boîte unidimensionnelle, est très restrictif. Ceci engendrerait une incompatibilité dans la diffusion relativiste, aussi bien que dans le problème des valeurs propres d'énergie, et la solution triviale devient inévitable. Cependant, les solutions non-triviales peuvent être obtenues en utilisant des *BCs* appropriées, de sorte à ce que la propriété d'hermiticité de l'opérateur formel de Dirac soit maintenue [47]. Physiquement, comme une interaction très localisée peut être due à l'interaction de la particule avec par exemple, une impureté ou un défaut local dans le solide, le cas "libre" correspond à la situation dans laquelle la particule n'est pas perturbée par cette interaction [48].

Le problème des *BCs* qui doivent être imposées pour une particule "libre" *DKP* (spin 0 et 1) à l'intérieur d'une boîte unidimensionnelle, n'a pas encore été considéré dans la littérature. Rappelons qu'exiger de la fonction d'onde *DKP* en interaction avec la barrière (2.23), d'être continue aux limites nous amène

inévitablement à la solution triviale [36]. Nous proposons dans ce chapitre, pour la particule *DKP* dans la boîte unidimensionnelle, différentes *BCs* pour lesquelles l'annulation totale de la fonction d'onde est impossible. En utilisant l'Hamiltonien formel H (3.32) avec $V = 0$, et en partant de l'idée que pour chaque système quantique, l'Hamiltonien doit être self-adjoint, dans notre cas pseudo-self-adjoint, nous chercherons les *BCs* qui assurent cette pseudo-hermiticité, et définissent le domaine de H . Si la densité de courant s'annule aux murs, la particule sera dite confinée à l'intérieur de la boîte. Si elle est différente de 0, les murs de la boîte lui seront alors perméables, et on dira que la particule est "libre".

4.2 Extension self-adjointe de l'Hamiltonien *DKP*, Conditions aux limites

A l'intérieur de la boîte unidimensionnelle définie par

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{pour } z \in \Delta = [0, L] \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (4.1)$$

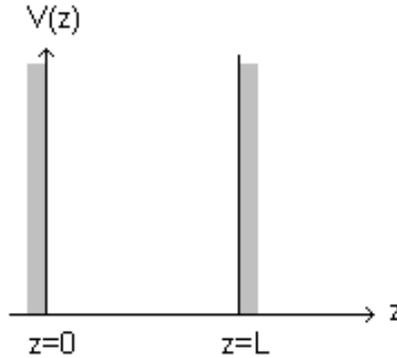


Figure 10. Boîte unidimensionnelle

la particule *DKP* est décrite par l'équation (Cf. 2.22) :

$$\left[\beta^0 E + i\beta^3 \frac{d}{dz} - m \right] \widetilde{\phi}(z) = 0 \quad (4.2)$$

dont la solution sera désignée par $\phi(z)^T = (\Psi, \Omega, \Theta)$ avec

$$\mathbf{O}_{KG}\Psi = 0, \quad \begin{pmatrix} \Omega \\ \Theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E}{m} \\ \frac{i}{m} \frac{d}{dz} \end{pmatrix} \otimes \Psi \quad (4.3)$$

L'Hamiltonien libre associé aux *composantes de la particule*, i.e., (Ψ, Ω) s'écrit (Cf. 3.32)

$$H = -\frac{1}{2m} (\tau'_1 - i\tau'_2) \frac{d^2}{dz^2} + m\tau'_1 \quad (4.4)$$

et il n'est pas hermitien. La condition de sa pseudo-hermiticité s'écrit:

$$\overline{H} = H \quad (4.5)$$

avec:

$$\overline{H} = \tau'_1 H^+ \tau'_1 \quad (4.6)$$

L'équation aux valeurs propres pour la particule *DKP* s'écrit:

$$\begin{aligned} (H\omega)(z) &= \left(-\frac{1}{2m} (\tau'_1 - i\tau'_2) \frac{d^2}{dz^2} + m\tau'_1 \right) \omega(z) \\ &= E\omega(z) \end{aligned} \quad (4.7)$$

et est équivalente aux équations couplées suivantes:

$$m\Omega = E\Psi \quad (4.8)$$

$$-\frac{1}{m} \frac{d^2}{dz^2} \Psi + m\Psi = E\Omega \quad (4.9)$$

On rappelle que tout en ayant des résultats identiques, on peut passer du cas de la particule vectorielle ($s = 1$) à celui de la particule scalaire ($s = 0$) -et vice versa-, en remplaçant dans (4.2) les matrices β^0 et β^3 de dimension 10×10 par celles de dimension 5×5 , et dans (4.4), les matrices τ'_i par les matrices de Pauli τ_i . Le spineur ω serait alors de dimension 2×1 au lieu de 6×1 .

Les fonctions d'onde $\omega(z)$ et $(H\omega)(z)$ appartiennent à une partie propre (strictement incluse (\subsetneq)) de l'espace pseudo-hilbertien \mathcal{H} , où il existe une base par rapport à laquelle on développe tout ω , avec un produit scalaire noté \langle, \rangle . Suivant chaque direction j du spin 1, l'élément ω a la forme:

$$\omega_j = \varphi \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E}{m} \end{pmatrix} \otimes \mathbf{V}_j \quad (4.10)$$

où les \mathbf{V}_j sont définis par: $\mathbf{V}_1^T = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 0, 0 \right)$; $\mathbf{V}_2^T = \left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0 \right)$; $\mathbf{V}_3^T = \left(0, 0, \frac{1}{\sqrt{3}} \right)$, et φ est définie par:

$$\Psi(z) = \varphi(z) \mathbf{V} \quad (4.11)$$

avec $\mathbf{V}^T = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}} \right)$.

On définit la norme par:

$$\langle \omega, \omega \rangle = \int \bar{\omega} \omega dz \quad (4.12)$$

avec $\bar{\omega} = \frac{1}{2} \omega^+ \tau_1'$, ω^+ étant l'adjoint de ω . Cette norme n'est pas définie positive, elle vaut (+1) pour les particules, et (-1) pour les antiparticules. C'est la raison pour laquelle \mathcal{H} est dit "pseudo-hilbertian".

Dans le but de caractériser $\varphi(z)$, nous éliminons Ω de (4.8) et (4.9) et nous obtenons:

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + k^2 \right) \varphi = 0 \quad (4.13)$$

dont une solution générale est donnée par:

$$\varphi = A\varphi^{(1)} + B\varphi^{(2)} = Ae^{ikz} + Be^{-ikz} \quad (4.14)$$

avec $k^2 = E^2 - m^2$, A et B constantes complexes, et $\varphi^{(1)}$, $\varphi^{(2)}$ les solutions particulières indépendantes, i.e. le wronskien $\begin{vmatrix} \varphi^{(1)} & \varphi^{(2)} \\ \frac{d\varphi^{(1)}}{dz} & \frac{d\varphi^{(2)}}{dz} \end{vmatrix}$ est non nul:

$$\varphi^{(1)} \frac{d\varphi^{(2)}}{dz} - \varphi^{(2)} \frac{d\varphi^{(1)}}{dz} \neq 0 \quad (4.15)$$

A partir de la relation de continuité $\partial_\mu J^\mu = 0$, nous dérivons la densité de charge:

$$\begin{aligned} \rho &= 3\bar{\omega}_j \omega_j \\ &= \frac{E}{m} |\varphi|^2 \end{aligned} \quad (4.16)$$

et la densité du courant:

$$\begin{aligned} j &= \frac{1}{2im} \left[\bar{\omega}_j (\tau_1' - i\tau_2') \frac{d\omega_j}{dz} - \left(\frac{d\bar{\omega}_j}{dz} \right) (\tau_1' - i\tau_2') \omega_j \right] \\ &= \frac{1}{2im} \left(\varphi^* \frac{d\varphi}{dz} - \frac{d\varphi^*}{dz} \varphi \right) \end{aligned} \quad (4.17)$$

La théorie de Von Neumann pour les extensions self-adjointes des opérateurs que nous allons suivre -naïvement-, concerne les opérateurs symétriques, c'est-à-dire, les opérateurs à domaine dense. Rappelons que dans un espace normé \mathcal{A} , un sous-espace \mathcal{U} est dit dense dans \mathcal{A} , si $\forall \xi \in \mathcal{A}, \exists (\xi_n)_{n \in \mathbb{N}} \in \mathcal{U}$, tel que

ξ_n converge vers ξ pour la topologie définie par la norme: $\lim_{n \rightarrow \infty} \|\xi_n - \xi\| = 0$. Cependant, on ne peut pas parler de densité pour le domaine de H , puisque la norme n'est pas définie positive. Nous introduisons dans ce cas la notion de densité faible.

Definition 1 Dans un espace pseudo-normé \mathcal{A} , un sous-espace \mathcal{U} est dit faiblement dense dans \mathcal{A} , si $\forall \xi \in \mathcal{A}, \exists (\xi_n)_{n \in \mathbb{N}} \in \mathcal{U}$, tel que, ξ_n converge faiblement vers ξ pour la topologie faible définie par le produit scalaire:

$$\forall g \in \mathcal{A}, \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \xi_n, g \rangle = \langle \xi, g \rangle.$$

Par la suite, puisque H doit être pseudo-self-adjoint, il est nécessaire qu'il soit symétrique, c'est à dire, que chaque état dans l'espace pseudo-hilbertien \mathcal{H} doit pouvoir être arbitrairement approximé par des états dans le domaine de H noté $D(H)$, et que pour tout $\xi, \eta \in D(H)$ l'on ait (en utilisant l'intégration par parties):

$$\langle H\xi, \eta \rangle - \langle \xi, H\eta \rangle = \frac{1}{4m} \left[\xi^+ (\mathbf{1} + \tau'_3) \frac{d\eta}{dz} - \frac{d\xi^+}{dz} (\mathbf{1} + \tau'_3) \eta \right]_0^L = 0 \quad (4.18)$$

soit, en posant $\xi^T = (\xi_1, \xi_2)$ et $\eta^T = (\eta_1, \eta_2)$:

$$\left[\xi_1^* \frac{d\eta_1}{dz} - \frac{d\xi_1^*}{dz} \eta_1 \right]_0^L = 0 \quad (4.19)$$

D'autre part, comme son pseudo-self-adjoint \overline{H} défini par le même opérateur formel (4.4) vérifie: $D(H) \subseteq D(\overline{H})$; il faudra alors que

$$\mathcal{D}(H) = \mathcal{D}(\overline{H}) \quad (4.20)$$

Certainement, si l'on choisit pour domaine de H

$$\mathcal{D}(H) = \{ \omega \in \mathcal{H}, \text{ continue sur } \Delta, (H\omega) \in \mathcal{H}, \omega \text{ vérifiant:} \quad (4.21) \\ \omega(0) = \omega(L) = 0 \text{ et } \omega'(0) = \omega'(L) = 0 \}$$

où $\omega' = \frac{d\omega}{dz}$, alors H est symétrique. Cependant, H n'est pas pseudo-self-adjoint puisque le domaine de \overline{H} qui est défini par

$$\mathcal{D}(\overline{H}) = \{ \pi \in \mathcal{H}, \text{ continue sur } \Delta, (\overline{H}\pi) \in \mathcal{H} \} \quad (4.22)$$

avec

$$\langle H\xi, \pi \rangle - \langle \xi, \overline{H}\pi \rangle = \frac{1}{4m} \left[\xi^+ (\mathbf{1} + \tau'_3) \frac{d\pi}{dz} - \frac{d\xi^+}{dz} (\mathbf{1} + \tau'_3) \pi \right]_0^L = 0 \quad (4.23)$$

pour tout $\xi \in \mathcal{D}(H)$ et $\pi \in \mathcal{D}(\overline{H})$, est plus grand que $\mathcal{D}(H)$. En effet, la condition ci-dessus qui s'écrit en posant $\pi^T = (\pi_1, \pi_2)$:

$$\left[\xi_1^* \frac{d\pi_1}{dz} - \frac{d\xi_1^*}{dz} \pi_1 \right]_0^L = 0 \quad (4.24)$$

est satisfaite, quelles que soient les valeurs prises par π aux murs de la boîte, étant donné que de par les *BCs* imposées à $\xi \in \mathcal{D}(H)$, $\xi_1 = \frac{d\xi_1}{dz} = 0$ en 0 et L . \overline{H} est pour ainsi dire, défini pour de nombreuses fonctions d'onde qui prennent des valeurs arbitraires aux extrémités de l'intervalle Δ . Le problème serait donc de choisir un ensemble de *BCs* assez générales, pour lesquelles $\mathcal{D}(H) = \mathcal{D}(\overline{H})$. Une fois que $\mathcal{D}(H)$ est fixé, \overline{H} sera le pseudo-adjoint de H , si son domaine maximal $\mathcal{D}(\overline{H})$ est compatible avec l'annulation de $\left[\xi^+ (\mathbf{1} + \tau'_3) \frac{d\pi}{dz} - \frac{d\xi^+}{dz} (\mathbf{1} + \tau'_3) \pi \right]_0^L$ pour tout $\xi \in \mathcal{D}(H)$.

Par ailleurs, en prenant $\omega(0) = 0$ et $\omega'(0) = 0$, i.e. $\varphi(0) = 0$ et $\varphi'(0) = 0$, nous obtenons le système homogène suivant:

$$\begin{cases} A\varphi^{(1)}|_{z=0} + B\varphi^{(2)}|_{z=0} = 0 \\ A\frac{d\varphi^{(1)}}{dz}|_{z=0} + A\frac{d\varphi^{(2)}}{dz}|_{z=0} = 0 \end{cases} \quad (4.25)$$

dont le déterminant $\varphi^{(1)}\frac{d\varphi^{(2)}}{dz}|_{z=0} - \varphi^{(2)}\frac{d\varphi^{(1)}}{dz}|_{z=0}$ est différent de 0 (Cf.4.15), d'où, $A = B = 0$, c'ad, l'unique solution est la solution triviale, i.e. $\omega = 0$. Les mêmes résultats sont obtenus pour $\omega(L) = 0$ et $\omega'(L) = 0$.

La non-existence de solutions non-triviales pour les *BCs* (4.21), est certainement une conséquence du fait que (4.13) est une équation elliptique, donc il n'y a pas de solution non-triviale si la fonction φ et sa dérivée φ' doivent s'annuler simultanément aux limites de l'intervalle Δ .

En imposant à la fonction d'onde la condition de Dirichlet:

$$\omega(0) = \omega(L) = 0 \quad (4.26)$$

i.e. $\varphi(0) = \varphi(L) = 0$, nous obtenons:

$$\omega_j = 2iA \sin k_n z \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E_n}{m} \end{pmatrix} \otimes \mathbf{V}_j \quad (4.27)$$

avec

$$k_n = \frac{n\pi}{L}, n = 1, 2, \dots \quad (4.28)$$

les valeurs discrètes de la quantité de mouvement, et

$$E_n = \left[m^2 + \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (4.29)$$

les valeurs propres discrètes positives de l'Hamiltonien correspondant aux états de norme positive (+1). La condition de symétrie: $\rho(0) = \rho(L)$ est vérifiée:

$$\rho(0) = \rho(L) = 0 \quad (4.30)$$

et aussi la condition de l'impénétrabilité:

$$j(0) = j(L) = 0 \quad (4.31)$$

Or, même si en $MQNR$, une fonction d'onde nulle aux limites est comptée parmi les extensions self-adjointes de l'Hamiltonien libre [47], l'annulation totale de la fonction d'onde relativiste au commencement d'une région impénétrable est inadmissible. Par conséquent, nous ne pouvons compter la BC (4.26), parmi les extensions pseudo- self-adjointes de l'Hamiltonien H .

En considérant la condition de Neumann:

$$\omega'(0) = \omega'(L) = 0 \quad (4.32)$$

i.e. $\varphi'(0) = \varphi'(L) = 0$, nous obtenons:

$$\omega_j = 2A \cos k_n z \left(\frac{1}{\frac{E_n}{m}} \right) \otimes \mathbf{V}_j \quad (4.33)$$

avec

$$\begin{aligned} k_n &= \frac{n\pi}{L}, n = 0, 1, 2.. \\ E_n &= \left[m^2 + \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (4.34)$$

respectivement, les valeurs discrètes de la quantité de mouvement, et les valeurs propres discrètes positives de l'Hamiltonien. La densité de courant vérifie aux murs la condition d'impénétrabilité:

$$j(0) = j(L) = 0 \quad (4.35)$$

aussi bien que la densité de charge donnée par

$$\rho(z) = 4 \frac{E_n}{m} |A|^2 \cos^2 \frac{n\pi}{L} z \quad (4.36)$$

vérifie la condition de symétrie

$$\rho(0) = \rho(L) = 4 \frac{E_n}{m} |A|^2 \quad (4.37)$$

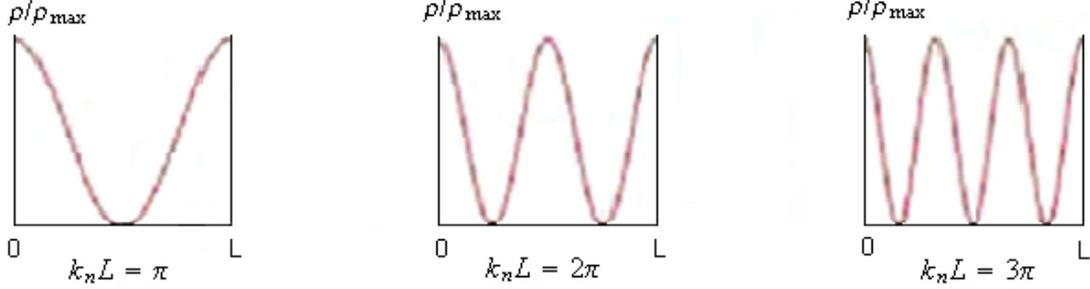


Figure 11. Illustration graphique de ρ/ρ_{\max} dans la boite unidimensionnelle pour la condition aux limites de Neumann. Aux murs de la boite la densité de charge est maximale: $\rho_{\max} = 4 \frac{E_n}{m} |A|^2$

Dans ce cas, on dit qu'il n'y a pas de particule pour $z < 0$ et $z > L$. Autrement dit, que la particule est enfermée dans la boite, ou qu'elle est contrainte par le potentiel à demeurer à l'intérieur de la boite Δ . La densité de charge ρ non nulle aux murs, pourrait être interprétée physiquement en disant que la particule atteint les murs, mais qu'elle ne peut pas les traverser car $j = 0$, et elle rebrousse alors son chemin. La situation est comparable à celle des particules chargées dans un milieu matériel. Satisfaisant l'équation de Lorentz $\vec{j} = \rho \vec{v}$, \vec{v} étant la vitesse des particules, le courant nul signifie l'annulation de leur vitesse.

La BC (4.32) est acceptable physiquement pour être une extension pseudo-self-adjointe de l'Hamiltonien H , et peut être utilisée dans le cas où l'on voudrait que soient impénétrables les murs de la boite, i.e. $\mathbf{R} = 1, \mathbf{T} = 0$.

Les conditions mixtes

$$\omega(0) = \pm \omega(L) \text{ et } \omega'(0) = \pm \omega'(L) \quad (4.38)$$

i.e. $\varphi(0) = \pm \varphi(L)$ et $\varphi'(0) = \pm \varphi'(L)$, entraînent

$$\omega_j = A e^{ik_n z} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E_n}{m} \end{pmatrix} \otimes \mathbf{V}_j \quad (4.39)$$

avec les valeurs discrètes de la quantité de mouvement

$$k_n = \frac{2n\pi}{L}, n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (4.40)$$

pour les conditions périodiques, et

$$k_n = \frac{(2n+1)\pi}{L}, n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (4.41)$$

pour les conditions antipériodiques. Les valeurs propres positives de l'Hamiltonien s'écrivent, respectivement

$$E_n = \left[m^2 + \left(\frac{2n\pi}{L} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (4.42)$$

et

$$E_n = \left[m^2 + \left(\frac{(2n+1)\pi}{L} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (4.43)$$

Notons que le niveau énergétique fondamental de (4.42) dans le sous-espace des énergies positives n'est pas dégénéré, et correspond à l'état $n = 0$:

$$E_0 = m \quad (4.44)$$

par contre le niveau énergétique fondamental de (4.43) dans le sous-espace des énergies positives, est dégénéré et correspond aux états $n = 0$ et $n = -1$:

$$E_0 = \left[m^2 + \frac{\pi^2}{L^2} \right]^{1/2} \quad (4.45)$$

Les densités de charge et de courant aux murs de la boîte vérifient

$$\rho(0) = \rho(L) = \frac{E}{m} |A|^2 \quad (4.46)$$

et

$$j(0) = j(L) = \frac{k_n}{m} |A|^2 \quad (4.47)$$

Avec les *BCs* (4.38), H est un opérateur pseudo-self-adjoint. Le courant non nul aux murs doit être interprété physiquement. On dira que les murs de la boîte sont transparents à la particule, ou encore que la particule "libre" serait en train de voyager à travers la boîte dans une condition de résonance [48], i.e. $\mathbf{R}=0, \mathbf{T}=1$.

Les valeurs propres négatives de l'Hamiltonien: $E_n = -\sqrt{k_n^2 + m^2}$, correspondent aux antiparticules qui seraient créées au voisinage des murs de la boîte. Rappelons que le phénomène de la particule *DKP* qui traverse un potentiel qui admet un saut infini en un point $z = z_0$

$$V(z) = \begin{cases} V_1 & \text{for } z < z_0 \\ V_2 & \text{for } z > z_0 \end{cases} \quad (4.48)$$

est lié à la création de paires particule-antiparticule, puisque le signe de la densité de charge au voisinage de $z = z_0$ change selon: $\rho(z_0^+) = \frac{E-eV_2}{E-eV_1} \rho(z_0^-)$. Ceci étant le paradoxe de Klein qu'on ne peut pas interpréter par la mer de Dirac car il s'agit de bosons, mais plutôt par la théorie quantique des champs [36].

Chapter 5

CONCLUSION

Dans ce travail, nous avons résolu l'équation DKP dans le cas de l'interaction avec le potentiel scalaire de Woods-Saxon, et, en partant du fait qu'il y a symétrie de charge dans le formalisme, nous avons réduit le problème à sa forme FV . Les fonctions d'onde furent données, et les coefficients de réflexion et de transmission dans le cas de la barrière correctement déterminés, et sont identiques dans les deux cas, spin 0 et spin 1. Les bonnes conditions aux limites ont été apportées, et elles furent testées dans le cas de la barrière de potentiel. Le paradoxe de Klein qui s'est manifesté via le "*Tunnel de Klein*", ne peut être expliqué en faisant appel à la mer de Dirac, étant donné que l'équation DKP ne concerne pas les fermions mais plutôt les bosons. Il pourrait cependant être expliqué en faisant appel à la théorie du champ quantifié.

Nous avons ensuite calculé la fonction de Green- DKP , et le résultat que nous avons obtenu s'écrit en termes de la fonction de Green- KG . Mais, nous n'avons pas pu en extraire les coefficients de réflexion et de transmission, car $G_{DKP}(E, z_f, z_i)$ n'a pu être décomposée en propagations d'énergie positive et négative. Ceci est dû à la singularité des matrices β^μ , et à l'apparition -en conséquence des *composantes subsidiaires*- du terme $\delta'(z_f - z_i)$, et des termes dérivés de $G_{KG}(E, z_f, z_i)$ dans l'expression obtenue. Nous avons alors -en nous basant sur l'analogie Feshbach-Villars-, proposé un Hamiltonien pour les $2(2s + 1)$ *composantes de la particule*, qui expriment la symétrie de charge existant dans le problème. La fonction de Green- DKP est alors obtenue en utilisant la fonction de Green- FV , et s'écrit sous forme d'une somme de deux contributions: l'une régulière $G_{KG}(E, z_f, z_i)$, pouvant être considérée comme la partie semi-relativiste, et l'autre purement relativiste $\delta(z_f - z_i)$, garantissant la puissance du potentiel. Et du fait que les équations de FV et de KG sont bien équivalentes, on peut avancer que le résultat obtenu, établit l'équivalence entre les théories DKP et KG sur la base de l'analogie FV . Les coefficients de réflexion et de transmission sont exactement ceux obtenus dans le chapitre précédent, d'où la confirmation que les *composantes subsidiaires* n'affectent pas le calcul de ces coefficients. Par ailleurs, la matrice de diffusion a été construite pour le spin 0 et le spin 1, et une similitude avec le cas FV a été notée.

La notion de spin des particules est, comme il est bien connu, intimement liée à la notion d'interaction. L'électron par exemple, n'est reconnu avoir un spin que lorsqu'il est mis en interaction avec un champ électromagnétique, et nous pourrions constater ici, le comportement identique dans leur processus de

diffusion, des particules de spin 0 et 1, lorsqu'ils sont confrontés à la même interaction, même qu'ils soient différents par leurs degrés de liberté internes.

En dernière partie du travail, nous avons étudié la particule DKP dans la boîte unidimensionnelle. En utilisant l'Hamiltonien des composantes ST , i.e. celui des *composantes de la particule*, et en suivant naïvement la théorie de Von Neumann pour les extensions self-adjointes des opérateurs, nous avons proposé certaines conditions aux limites, parmi lesquelles celle de Dirichlet qui n'a pas été retenue physiquement comme étant une extension pseudo-self-adjointe de l'Hamiltonien, du fait que l'annulation totale de la fonction d'onde relativiste au commencement d'une région impénétrable est inadmissible. Par ailleurs, avec la condition de Neumann, les murs de la boîte sont des barrières impénétrables ($\mathbf{R} = 1, \mathbf{T} = 0$), et la particule DKP est enfermée à l'intérieur de la boîte. Cependant, avec les conditions mixtes (sauf dans le cas des conditions périodiques lorsque $n = 0$, la particule est alors enfermée à l'intérieur de la boîte), les murs sont transparents pour la particule "libre" DKP , qui voyage à travers la boîte dans une condition de résonance ($\mathbf{R} = 0, \mathbf{T} = 1$). Ceci étant intimement lié au phénomène de création de paires de particules au voisinage des murs de la boîte.

Dans le cas des particules scalaires de KG , les processus de diffusion par un potentiel unidimensionnel exhibent les mêmes propriétés physiques que les ondes s en présence d'un potentiel radial [28]. Par conséquent, il serait intéressant de vérifier si les résultats obtenus pour le spin 0 peuvent être étendus au cas du potentiel radial de WS , et ensuite compléter l'étude pour le cas du spin 1. Et, dans le souci de se rapprocher le plus possible des cas réels, on suggère de réétudier la particule DKP dans le cas d'un potentiel à trois dimensions, en choisissant par exemple le potentiel Coulombien. D'autre part, les conditions aux limites étant intimement liées au "Tunnel de Klein", il serait intéressant d'établir une relation entre ce dernier et les BCs via la fonction de Green. La possibilité de l'existence d'états liés d'antiparticules dans le cas du puits de potentiel de WS devrait aussi être investiguée.

Appendix A

ANNEXES DE MATHEMATIQUES

A.1 Définitions

A.1.1 Espace de Hilbert

Un espace de Hilbert est un espace de Banach dont la norme $\| \cdot \|$ découle d'un produit scalaire ou hermitien $\langle \cdot, \cdot \rangle$ par la formule:

$$\| x \| = \sqrt{\langle x, x \rangle} \quad (\text{A.1})$$

Dans le cas réel, le produit scalaire est défini par:

$$\langle x, y \rangle = \frac{1}{4} (\|x + y\|^2 - \|x - y\|^2) \quad (\text{A.2})$$

Dans le cas complexe, le produit hermitien est défini par:

$$\langle x, y \rangle = \langle x, y \rangle_1 + i \langle x, iy \rangle \quad (\text{A.3})$$

avec

$$\langle x, y \rangle_1 = \frac{1}{4} [\|x + y\|^2 - \|x - y\|^2] \quad (\text{A.4})$$

où i est l'unité imaginaire

Un espace de Hilbert est la généralisation à une dimension quelconque d'un espace euclidien ou hermitien.

Un espace de Banach est un espace vectoriel normé et complet (où toute suite de Cauchy converge). Un espace de Banach est un espace de Hilbert si et seulement si, sa norme vérifie l'égalité:

$$\|x + y\|^2 + \|x - y\|^2 = 2 (\|x\|^2 + \|y\|^2) \quad (\text{A.5})$$

Dans un espace de Hilbert de dimension infinie, le concept habituel de base est remplacé par celui de base de Hilbert, qui permet de décrire un vecteur non plus par ses coordonnées, mais de l'approcher par une suite infinie de vecteurs, ayant chacun des coordonnées finies. On est donc au confluent de l'algèbre linéaire et de la topologie.

C'est dans le cadre des espaces de Hilbert qu'est développée la théorie de la formulation variationnelle, utilisée dans de nombreux domaines de la physique. En mécanique quantique, l'état d'un système est représenté par un vecteur dans un espace de Hilbert. Comme exemples d'espaces de Hilbert, nous citons:

* \mathbb{R}^n muni du produit scalaire usuel.

$*L^2([a, b])$: espace des fonctions de carré sommable muni de

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x) g(x) dx \quad (\text{A.6})$$

$*L_{\mathbb{C}}^2([a, b])$: espace des fonctions complexes de carré sommable muni de

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f^*(x) g(x) dx \quad (\text{A.7})$$

A.1.2 Fonction continue et fonction absolument continue

Soit I un intervalle réel, et soient $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ et $a \in I$. La fonction f est continue en a si:

$$\lim_{x \rightarrow a} f(x) = f(a) \quad (\text{A.8})$$

Autrement dit :

$\forall \varepsilon > 0, \exists \eta > 0$ tel que $\forall x \in I, |x - a| \leq \eta \Rightarrow |f(x) - f(a)| \leq \varepsilon$

Si une fonction f est continue sur un intervalle $I = [a, b]$, alors la fonction F définie sur $[a, b]$ par:

$$F = \int_a^x f(t) dt \quad (\text{A.9})$$

est dérivable sur $[a, b]$ et sa dérivée est égale à f .

On dit que la fonction f est absolument continue (*a.c.*) sur un intervalle $I = [a, b]$ si : $\forall \varepsilon > 0, \exists \eta > 0$ tel que: $\forall ([a_n, b_n])_{n \in \mathbb{N}}$ suite de sous-intervalles de I d'intérieurs disjoints, $\sum_n (b_n - a_n) < \eta \Rightarrow \sum_n |f(a_n) - f(b_n)| < \varepsilon$

Si une fonction f est continue sur un intervalle $I = [a, b]$, il existe une fonction F intégrable sur $[a, b]$ tel que: $\forall x \in [a, b], f(x) - f(a) = \int_a^x F(t) dt$, si et seulement si f est absolument continue sur $[a, b]$.

A.2 Extension self-adjointe de l'Hamiltonien de Dirac

Le spineur de Dirac $\Psi(x)$ (Cf. 1.34) peut se mettre sous la forme:

$$\Psi(x) = \sum_{i=1}^4 \Phi_i \quad (\text{A.10})$$

avec $\Phi_1^T = (\Psi_1, 0, 0, 0)$, $\Phi_2^T = (0, \Psi_2, 0, 0)$, $\Phi_3^T = (0, 0, \Psi_3, 0)$, $\Phi_4^T = (0, 0, 0, \Psi_4)$, d'où la norme:

$$\begin{aligned} \langle \Psi, \Psi \rangle &= \int \Psi^+ \Psi dx \\ &= \sum_{i=1}^4 \int |\Phi_i|^2 \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Les spineurs $\Psi(x)$ et $(H_D \Psi)(x)$ appartiennent à une partie propre et dense de l'espace de Hilbert \mathcal{H} [47]:

$$\mathcal{H} = \mathbf{L}^2(\Omega) \oplus \mathbf{L}^2(\Omega) \oplus \mathbf{L}^2(\Omega) \oplus \mathbf{L}^2(\Omega) \quad (\text{A.12})$$

i.e. dans cet espace il existe une base dans laquelle développer tout Ψ , avec un produit scalaire noté par \langle, \rangle .

En utilisant la théorie de Von Neumann pour les extensions self-adjointes des opérateurs symétriques, nous allons brièvement considérer la construction d'un opérateur self-adjoint à partir de l'Hamiltonien formel libre de Dirac donné par (1.198). Le domaine de H_D noté $D(H_D)$, doit être choisi de sorte à ce que H_D soit symétrique, càd, de sorte à ce que chaque état de \mathcal{H} puisse être arbitrairement approximé par des états de $D(H_D)$, et que pour tout $\xi, \eta \in D(H_D)$ on ait:

$$\langle H_D \xi, \eta \rangle - \langle \xi, H_D \eta \rangle = i [\xi^+ \alpha_x \eta]_0^L = 0 \quad (\text{A.13})$$

On choisit le domaine dense pour lequel H_D est symétrique:

$$D(H_D) = \{ \Psi \in \mathcal{H}, a.c \text{ sur } \Omega, (H_D \Psi) \in \mathcal{H}, \text{ avec: } \Psi(0) = \Psi(L) = 0 \} \quad (\text{A.14})$$

où *a.c* signifie absolument continue. Rappelons que par définition, si un opérateur T d'adjoint T^+ est à domaine dense dans \mathcal{H} , il est

- Symétrique si $D(T) \subset D(T^+)$
- Self-adjoint si $D(T) = D(T^+)$

La mécanique quantique requiert de H_D d'être self-adjoint, donc la condition:

$$D(H_D) = D(H_D^+) \quad (\text{A.15})$$

doit être satisfaite, où H_D^+ l'adjoint de H_D , est défini par le même opérateur formel (1.198), et son domaine est défini par:

$$D(H_D^+) = \{ \nu \in \mathcal{H}, a.c \text{ sur } \Omega, (H_D^+ \Psi) \in \mathcal{H} \} \quad (\text{A.16})$$

avec, pour tout $\xi \in D(H_D)$ et $v \in D(H_D^+)$:

$$\langle H_D \xi, v \rangle - \langle \xi, H_D^+ v \rangle = i [\xi^+ \alpha_x v]_0^L = 0 \quad (\text{A.17})$$

Manifestement, H_D^+ est définie sur une variété de spineurs prenant des valeurs arbitraires aux points extrêmes de Ω . La BC imposée dans (A.14) et qu'on ne retrouve pas dans (A.16) est incompatible avec la condition (A.15) d'hermiticité de H_D . Plus précisément, la relation (A.17) qui s'écrit:

$$(\xi_4^* v_1 + \xi_1^* v_4)(L) - (\xi_4^* v_1 + \xi_1^* v_4)(0) = 0 \quad (\text{A.18})$$

est satisfaite, quelles que soient les valeurs prises par v aux bornes de l'intervalle Ω , à partir du moment que de par la BC imposée à $\xi \in D(H_D)$, $\xi_4 = \xi_1 = 0$ en 0 et L . Le problème consisterait donc en le choix d'un ensemble de BCs suffisamment générales pour assurer $D(H_D) = D(H_D^+)$. Une fois que $D(H_D)$ est fixé, H_D^+ sera l'adjoint de H_D si son domaine est en harmonie avec $i [(\xi^+ \alpha_x v)]_0^L = 0$ pour tout $\xi \in D(H_D)$. On cite la famille suivante de BCs , toutes extensions self-adjointes de H_D :

$$\begin{pmatrix} \phi_1(L) \\ \phi_1(0) \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} -\chi_2(L) \\ \chi_2(0) \end{pmatrix} \quad (\text{A.19})$$

où

$$A = \frac{i}{\sin \mu + \sin \tau \cos \theta} \begin{pmatrix} \cos \mu + \cos \tau \cos \theta & e^{i\gamma} \sin \theta \\ e^{-i\gamma} \sin \theta & \cos \mu - \cos \tau \cos \theta \end{pmatrix} \quad (\text{A.20})$$

avec $\sin \mu + \sin \tau \cos \theta \neq 0$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \mu$, et $\tau, \gamma \in [2\pi]$.

A.3 Résolution d'une équation différentielle de type hypergéométrique

Les équations différentielles du type:

$$u'' + \frac{\tilde{\tau}(y)}{\sigma(y)}u' + \frac{\tilde{\sigma}(y)}{\sigma^2(y)}u = 0 \quad (\text{A.21})$$

avec $\sigma(y)$ et $\tilde{\sigma}(y)$ polynômes de degré ≤ 2 , et $\tilde{\tau}(y)$ polynôme de degré ≤ 1 , sont appelées fonctions spéciales de la physique mathématique [6], ou aussi équations généralisées de type hypergéométrique, et admettent comme solutions particulières des fonctions spéciales appartenant aux classes suivantes:

- Polynômes orthogonaux classiques (de Jacobi, de Laguerre et d'Hermitte)
- Fonctions sphériques
- Fonctions cylindriques
- Fonctions hypergéométriques.....

En posant

$$u = \varphi(y) \tilde{u} \quad (\text{A.22})$$

et en faisant un choix particulier de la fonction $\varphi(y)$, l'équation (A.21) prend la forme:

$$\tilde{u}'' + \left(2\frac{\varphi'}{\varphi} + \frac{\tilde{\tau}}{\sigma}\right)\tilde{u}' + \left(\frac{\varphi''}{\varphi} + \frac{\varphi'\tilde{\tau}}{\varphi\sigma} + \frac{\tilde{\sigma}}{\sigma^2}\right)\tilde{u} = 0 \quad (\text{A.23})$$

qu'on simplifie en posant:

$$\left(2\frac{\varphi'}{\varphi} + \frac{\tilde{\tau}}{\sigma}\right) = \frac{\tau}{\sigma} \quad (\text{A.24})$$

d'où

$$\frac{\varphi'}{\varphi} = \frac{\delta}{\sigma} \quad (\text{A.25})$$

avec

$$\delta = \frac{1}{2}[\tau - \tilde{\tau}] \quad (\text{A.26})$$

et $\delta(y)$ étant un polynôme de degré ≤ 1 . Ainsi (A.23) devient:

$$\tilde{u}'' + \frac{\tau}{\sigma}\tilde{u}' + \frac{\lambda}{\sigma^2}\tilde{u} = 0 \quad (\text{A.27})$$

où

$$\lambda = \tilde{\sigma} + \delta^2 + \delta[\tilde{\tau} - \sigma'] + \delta'\sigma \quad (\text{A.28})$$

avec

$$\tau = \tilde{\tau} + 2\delta \quad (\text{A.29})$$

et $\tau(y)$ et $\lambda(y)$ étant deux polynômes de degré non supérieur à 1 et 2 respectivement. En posant:

$$\lambda(y) = \beta\sigma(y) \quad (\text{A.30})$$

β étant une constante, l'équation (A.27) devient:

$$\tilde{u}'' + \frac{\tau}{\sigma}\tilde{u}' + \frac{\beta}{\sigma}\tilde{u} = 0 \quad (\text{A.31})$$

et on tire à partir de (A.28) :

$$\delta^2 + [\tilde{\tau} - \sigma']\delta + \tilde{\sigma} - \kappa\sigma = 0 \quad (\text{A.32})$$

avec

$$\kappa = \beta - \delta'(y) \quad (\text{A.33})$$

où κ est une constante qui annule le discriminant du radicande de $\delta(y)$ défini par:

$$\delta(y) = \frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma} + \kappa\sigma} \quad (\text{A.34})$$

Reprenons l'équation (2.33) qui s'écrit:

$$\frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{(1-2y)}{y(1-y)}\frac{d\Psi}{dy} + \frac{r^2[(E - eV_0y)^2 - m^2]}{y^2(1-y)^2}\Psi = 0 \quad (\text{A.35})$$

et en l'identifiant avec (A.21) on obtient:

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}(y) &= (1-2y) \\ \sigma(y) &= y(1-y) \\ \tilde{\sigma}(y) &= r^2[(E - eV_0y)^2 - m^2] \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

On pose:

$$\Psi = \varphi(y)\tilde{\Psi} \quad (\text{A.37})$$

et on écrit:

$$\tilde{\Psi}'' + \frac{\tau}{\sigma}\tilde{\Psi}' + \frac{\beta}{\sigma}\tilde{\Psi} = 0 \quad (\text{A.38})$$

Comme $\sigma'(y) = \tilde{\tau}(y)$, on tire à partir de (A.30):

$$\delta^2 = \kappa\sigma - \tilde{\sigma} \quad (\text{A.39})$$

et en mettant $\delta(y)$ sous la forme:

$$\delta(y) = ay + b \tag{A.40}$$

on obtient finalement:

$$\varphi(y) = Cy^b (1 - y)^{-(a+b)} \tag{A.41}$$

où C est une constante complexe, avec

$$\begin{aligned} a &= -(\mu + \nu) \\ b &= \mu \end{aligned} \tag{A.42}$$

et

$$\begin{aligned} \mu^2 &= r^2 (m^2 - E^2) \\ \nu^2 &= r^2 [m^2 - (E - eV_0)^2] \end{aligned} \tag{A.43}$$

Appendix B

LEXIQUE

***Covariance:** En physique théorique, une équation est dite covariante sous un groupe de transformations donné, si et seulement si, elle garde la même forme mathématique après application d'une opération de groupe. Les deux membres de l'équation doivent être des tenseurs de même type. Exemples:

* Les équations de Maxwell de l'électromagnétisme classique, sont covariantes sous le groupe de transformations de Lorentz.

* Les équations d'Einstein de la relativité générale, sont covariantes sous le groupe des difféomorphismes de l'espace-temps.

* Les équations de la théorie quantique des champs du modèle standard de la physique des particules, sont covariantes sous le groupe des transformations de Lorentz.

***Effet Aharonov-Bohm:** Découvert en 1959 par David Bohm et Yakir Aharonov, c'est une mise en évidence quantique du fait que la quantité de mouvement (classique) des particules de charge q est égale à $q\mathbf{A}$ où \mathbf{A} est le potentiel vecteur.

***Espace métrique:** C'est un ensemble au sein duquel est définie la notion de distance entre les éléments. C'est un cas particulier d'espace topologique. Comme exemple, l'espace euclidien à trois dimensions, dans lequel la métrique définit la distance entre deux points comme étant la longueur du segment qui les relie.

***Espace topologique:** Les espaces topologiques permettent de définir dans un contexte très général les concepts de la convergence, de la continuité et de la connexité. La branche des mathématiques qui étudie ces espaces s'appelle la topologie et concerne l'étude des déformations spatiales par des transformations

continues.

***Groupes de Lie:** Groupes dont les opérations (multiplication, formation d'inverses) sont analytiques. Exemples:

* L'espace euclidien \mathbb{R}^n muni de l'addition vectorielle ordinaire.

* $O(n)$ groupe orthogonal sur \mathbb{R} d'ordre n : groupe multiplicatif des matrices $n \times n$ réelles orthogonales (vérifiant ${}^tMM = \mathbf{1}_n$).

* $SO(n)$ groupe spécial orthogonal sur \mathbb{R} d'ordre n : groupe multiplicatif des matrices $n \times n$ réelles orthogonales (${}^tMM = \mathbf{1}_n$) avec $\det M = 1$.

* $U(n)$ groupe unitaire sur \mathbb{C} d'ordre n : groupe multiplicatif des matrices $n \times n$ complexes unitaires (vérifiant $M^*M = \mathbf{1}_n$).

* $SU(n)$ groupe spécial unitaire sur \mathbb{C} d'ordre n : groupe multiplicatif des matrices $n \times n$ complexes unitaires ($M^*M = \mathbf{1}_n$) avec $\det M = 1$.

***Intervalle d'univers:** C'est l'intervalle de temps propre entre deux événements représentés chacun par un point de l'espace-temps. Il est indépendant du référentiel choisi.

***Modèle standard:** C'est la théorie de référence qui décrit les constituants élémentaires de la matière (les fermions) et les interactions fondamentales (gravitationnelle, électromagnétique, faible et forte) auxquelles ils participent.

Les constituants élémentaires de la matière se partagent en deux grandes catégories: les leptons qui ne participent pas à l'interaction forte, et les quarks qui participent à toutes les interactions.

***Modèle en couches:** C'est un modèle du noyau atomique qui utilise le principe d'exclusion de Pauli pour décrire la structure des noyaux en termes de niveaux d'énergie. Il suppose une forte interaction entre le moment angulaire intrinsèque (ou « spin ») des nucléons, et leur moment angulaire orbital.

***Norme:** C'est la grandeur attachée à chaque élément d'un espace vectoriel, et dont les propriétés généralisent celles de la valeur absolue pour les nombres entiers, et celles du module pour les nombres complexes.

***Opérateur conjugaison de charge :** opérateur C dont les valeurs propres sont $+1$ et -1 , et qui transforme une particule en son antiparticule. Il change le signe des grandeurs représentées par des nombres algébriques (charge électrique, nombre baryonique et leptonique), et laisse invariante les grandeurs représentées par des nombres arithmétiques (masse, spin).

***Photon:** Le photon est la particule élémentaire qui transmet l'interaction électromagnétique. Chaque onde électromagnétique transporte des photons qui

ont une énergie bien déterminée. Cette énergie peut être transférée à la matière par paquet – ou quanta .

***Principe de Causalité:** Hypothèse suivant laquelle un ensemble de conditions parfaitement connues est toujours suivi des mêmes effets. La notion vague de relation entre causes et effets, prend une forme précise en physique classique: si une loi s'exprime par une équation différentielle, et si l'on connaît les *conditions initiales*, l'état du système est déterminé ultérieurement, à un certain degré de précision pratique.

Dans l'étude des systèmes physiques qui donnent une réponse S à une excitation E , le principe de causalité indique que le temps t étant pris pour une variable indépendante, $S(t)$ ne peut dépendre de $E(t')$ que pour $t' \leq t$.

En relativité, il ne peut y avoir de relation causale entre deux phénomènes que si l'*intervalle d'univers* qui les sépare est réel.

En physique quantique, la fonction d'état Ψ obéit à une équation différentielle, mais les grandeurs physiques déterminables à un instant donné ne suffisent pas à définir complètement la valeur initiale de Ψ , ce qui retire son sens à la causalité stricte.

***QED:** Electrodynamique quantique relativiste, première théorie quantique des champs dans laquelle les difficultés pour élaborer un formalisme permettant la création et l'annihilation de particules ont été résolus de façon satisfaisante. Selon cette théorie qui concilie l'électromagnétisme avec la mécanique quantique en utilisant un formalisme Lagrangien relativiste, les charges électriques interagissent par échange de photons.

***QCD:** Chromodynamique quantique ou théorie des interactions fortes. Elle utilise la théorie quantique des champs et tire son nom de la couleur des quarks.

***Spin :** propriété quantique intrinsèque associée à chaque particule au même titre que sa masse et sa charge électrique. Il permet de caractériser le comportement de la particule sous l'effet de la symétrie de rotation de l'espace. C'est en fait le moment cinétique intrinsèque des particules élémentaires et des noyaux atomiques.

La notion de spin permet de classer mathématiquement la façon dont se transforment les objets sous l'effet des rotations de l'espace à trois dimensions. De façon générale, un objet possède un spin s s'il est invariant sous une rotation d'angle $\frac{2\pi}{s}$. Remarquons que d'ordinaire, puisqu'une rotation d'angle 2π est égale à l'identité, il semblerait que tout objet soit de spin entier, car dans le pire des cas,

un objet devrait toujours être identique à lui-même sous une rotation d'angle 2π . Pourtant, l'analyse mathématique rigoureuse du groupe des rotations, montre une structure subtile qui permet à certains objets d'avoir un spin demi-entier. Pour de tels objets, faire un tour complet sur eux-mêmes n'est pas suffisant pour les faire revenir à leur position de départ, et il est nécessaire d'effectuer une rotation d'angle 4π . De tels objets existent à l'échelle microscopique et sont appelés les fermions, dont un exemple bien connu est l'électron, qui possède précisément un spin $\frac{1}{2}$. Exemples:

Spin 0 : les pions π , les kaons K .

Spin 1/2 : l'électron, le positron, le proton, le neutron, les neutrinos, les quarks, etc.

Spin 1 : le photon, les bosons W^\pm et Z^0 vecteurs de l'interaction faible, les mésons ρ et φ sensibles à l'interaction forte.

Spin 2 : le graviton, particule hypothétique vecteur de la gravitation.

***Symétrie:** En physique, la notion de symétrie appelée aussi invariance, renvoie à la possibilité de considérer un même système physique selon plusieurs points de vues distincts en termes de description, mais équivalents quant aux prédictions effectuées sur son évolution.

En physique des particules, la loi de conservation de l'énergie impose que lors d'une réaction nucléaire ou d'une désintégration, la somme des énergies des particules de départ soit la même que la somme des énergies des particules émises.

***Système dynamique:** système classique qui évolue au cours du temps de façon à la fois :

causale, c'est-à-dire que son avenir ne dépend que des phénomènes du passé ou du présent ;

déterministe, c'est-à-dire qu'à une « condition initiale » donnée à l'instant « présent », va correspondre à chaque instant ultérieur un et un seul état « futur » possible.

L'évolution *déterministe* du système dynamique peut se modéliser de deux façons distinctes : une évolution continue dans le temps, représentée par une équation différentielle ordinaire, ou une évolution discontinue dans le temps. Ce second cas est souvent le plus simple à décrire mathématiquement, même s'il peut sembler a priori moins réaliste physiquement. Cependant, l'étude théorique de ces modèles discrets est fondamentale, car elle permet de mettre en évidence des résultats importants, qui se généralisent souvent aux évolutions dynamiques

continues. On exclut donc ici conventionnellement les systèmes « bruités » intrinsèquement stochastiques, qui relèvent de la théorie des probabilités.

***Temps propre:** En théorie relativiste, on appelle temps propre s d'une particule représentée par le quadrivecteur x^μ ($\mu = 0, 1, 2, 3$), la quantité scalaire dont l'élément infinitésimal est donné par $ds^2 = g_{\mu\nu}dx^\nu dx^\mu$, avec $g_{\mu\nu}$ le tenseur métrique de Minkowski.

***Tenseur:** Entité géométrique ayant 3^n composantes dans un système de coordonnées à 3 dimensions. n est le rang ou ordre du tenseur. Un scalaire est un tenseur d'ordre 0. Un vecteur est un tenseur d'ordre 1.

***Transformations de Lorentz:** Elles interviennent en relativité restreinte et dans les calculs relativistes en tant que "transformations" mathématiques linéaires, tel que la vitesse de la lumière soit la même dans tous les référentiels inertiels. La conséquence la plus étonnante est que le temps n'est plus "universel" mais dépendant du référentiel.

Soient deux référentiels \mathbb{R} et \mathbb{R}' en translation rectiligne l'un par rapport à l'autre sur des axes parallèles, avec une vitesse relative v selon l'axe Ox . Lorsque l'on passe du premier référentiel au second, les coordonnées sont liées par la transformation de Lorentz qui s'écrit de façon matricielle:

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\beta & 0 & 0 \\ -\gamma\beta & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

avec $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$; $\beta = \frac{v}{c}$.

***Variables dynamiques:** ou variables d'état, sont toutes les grandeurs physiques qui déterminent l'état instantané du système.

Bibliography

- [1] Petiau, Acad. R. Belg. Mem. Collect. **16** (1936).
- [2] N. Kemmer, Proc. R. Soc. A 173 (1939) 91.
- [3] R.Y. Duffin, Phys. Rev. **54** (1938) 1114.
- [4] J. T. Lunardi, B. M. Pimentel, R.G. Teixeira and J. S. Valverde, Phys. Lett. **A 268**(2000)165.
- [5] V. Gribov, Eur. Phys. J. C **10** (1999) 71
- [6] Fonctions spéciales de la physique mathématique, A. Nikiforov, V. Ouvarov
- [7] V.M.Red'kov, arXiv:quant-ph/9812007.
- [8] C. Itzykson and J. B. Zuber, *Quantum Field Theory* (Mc-Graw Hill, Singapore, 1980)
N. N. Bogoliubov and D. V. Shirkov, *Introduction to the Theory of Quantized Fields* (Wiley, New York, 1980)
- [9] W. Greiner, Relativistic Quantum Mechanics, Springer, berlin, 1990, p.35./ou 1997
- [10] *Mécanique Quantique*, Tomes 1 et 2, Dunod Paris 1965, Albert Messiah.
- [11] A. Calogeracos, N. Dombey, Int. J. Mod. Phys. **A 14** (1999) 631.
- [12] A.I. Nikishov, Nucl. Phys. B **21** (1970) 346
- [13] A. Hansen, F. Ravndal, Phys. Scripta **23** (1981) 1033

- [14] N.Gasmia, "*La matrice de diffusion d'un méson π chargé dans un potentiel scalaire dans le formalisme de Feshbach-Villars*" Magister, Constantine 2004.
- [15] Y. Nogami and C.K.Ross, *Am.J.Phys* **64** (7), 923 (1996).
- [16] K. Khounfais, T. Boudjedaa, L. Chetouani, *Czech. J. Phys.* **54** (2004) 697
- [17] M G E da Luz , E J Heller and Bin Kang Cheng, *J. Phys. A: Maths. Gen.* **31**(1998) 2975-2990.
- [18] Richard Crandall E., *J. Phys. A*, **26** (1993) 3627.
- [19] H. Feshbach and F. Villars, *Rev. Mod. Phys.* **30**(1958) 24.
- [20] V.Ya. Fainberg and B.M. Pimental, *Phys.Lett.* **A271**(2000) 16.
V.Ya. Fainberg and B.M. Pimental, *Theor.Math.Phys.* **124** (2000) 1234.
V.Ya. Fainberg and B.M. Pimental, *Theo. Math. Phys.* **143** (2005)792.
- [21] J. T. Lunardi, L.A. Manzoni, B.M. Pimentel and J.S. Valverde, hep-th/0008098.
- [22] L.Chetouani, M.Merad, T. Boudjedaa and A. Lecheheb, *Int. J. Theor. Phys.* **43** (4) (2004)1147
- [23] Partha Ghose, Manoj K. Samal and Animesh Datta, *Phys. Lett.***315**, 1-2, 23 (2003)
- [24] R. D. Woods and D. S. Saxon, *Phys. Rev.* **95**, 577(1954).
- [25] M. G. Mayer and J. H. D. Jensen, *Elementary Theory of Nuclear Shell Structure* (Wiley, New York, 1955).
A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure*, Vol. I (Benjamin, New York, 1969).
P. Ring and P. Shuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer Verlag, Berlin, 1980).
- [26] R. A. Broglia and A. Winther, *Heavy Ion Reactions*, Vol. 84 in *Frontiers in Physics Lecture Notes Series* (Addison-Wesley, Redwood City, CA, 1991).
P. R. Christensen, and A. Winther, *Phys. Lett.* **65 B 19** (1976).

- [27] J. O. Newton, R. D. Butt, M. Dasgupta, D. J. Hinde, I. I. Gontachar, C. R. Morton, and K. Hagino, Phys. Lett B 586, 219 (2004); Phys. Rev. **C70**, 024605 (2004).
- [28] Victor M. Villalba and Clara Rojas, Int. J. Mod. Phys. **A 21** (2006) 313-326
Clara Rojas and Victor M. Villalba, Revista Mexicana de Fisica **S 52** (3)127-129 (2005).
Clara Rojas and Victor M. Villalba, Physical Review **A 71**, 052101 (2005).
- [29] Y. Nedjadi and R. C. Barrett, J. Phys. G : Nucl. Part. Phys. **19** (1993) 87.
J. Math. Phys. **35** (1994) 4517.
J. Phys. A : Math. Gen. **31**(1998) 6717.
- [30] L S Costa, F V prudente, P H Acioli, J J Soares Neto and J D M Vianna, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **32** (1999) 2461-2470.
- [31] M.Merad, L.Chetouani and A.Bounames, Phys.Lett. A267(2000) 225.
A. Bounames and L. Chetouani,Phys.Lett.**A279**(2001) 139.
- [32] K.Khounfais, T.Boudjedaa and L. Chetouani, "Scattering matrix for Feshbach-Villars equation for spin 0 and 1/2 : Woods-Saxon potential", Czech.J.Phys.**54**(2004) 679
- [33] P. K jena, P.C. Naik and T. Pradhan, J.Phys. A: Math.Gen.**13** 2975 (1980)
- [34] Ru-Keng Su, G.C.Siu and Xiu Chou, J.Phys. A **26**,1001(1993)
- [35] N.Dombey and A.Calogeracos, Physics Reports. **315**,41 (1999)
- [36] B. Boutabia-Chéraitia and T. Boudjedaa, Phys.Lett. **A 338** (2005)97-107
- [37] K. Miyazaki, Progress of Theoretical Physics 85 (1991) 81-99.
- [38] B.Boutabia-Chéraitia, T.Boudjedaa and M.Merad, "Duffin-Kemmer-Petiau Green function for spin 0 and 1 in barrier potential" in, *Les actes de physique théorique et mathématique des journées Algéro-Françaises de Ouargla*, Université de haute Alsace, janvier 2006.
- [39] T. Boudjedaa, L. Chetouani, M. Merad, Nuovo Cimento 114B 1261(1999).

-
- [40] T. Boudjedaa, L. Chetouani, M. Merad, Chinese Journal of Physics, VOL.38, No 6, December 2000
- [41] R. A. Krajcik and M. M. Nieto, Physical Review D, Volume 14, Number 2, 15 July 1976
- [42] R. A. Krajcik and M. M. Nieto, Physical Review D, volume 11, number 6, 1442-1458, 15 March 1975
- [43] R. A. Krajcik and M. M. Nieto, Physical Review D, Volume 13, Number 4, 15 February 1976
- [44] R. A. Krajcik and M. M. Nieto, Physical Review D, volume 10, number 12, 15 December 1974
- [45] R. A. Krajcik and M. M. Nieto, Physical Review D, volume 11, number 6, 1459-1471, 15 March 1975
- [46] R. A. Krajcik and M. M. Nieto, American Journal of Physics, vol. 45, No. 9, September 1977
- [47] Vidal Alonso, Salvatore De Vincenzo and Luigi Mondino, Eur. J. Phys. **18**(1997)315-320
- [48] Vidal Alonso and Salvatore De Vincenzo, J. Phys. A: Math. Gen. **32**(1999)5277-5248
- [49] Vidal Alonso and Salvatore De Vincenzo, J. Phys. A: Math. Gen. **30**(1997)8573-8585
- [50] P. Alberto, C. Fiolhais and V.M.S. Gil, Eur. J. Phys. **17**(1996)19-24
- [51] L. Chetouani and T. F. Hamman, Nuovo Cimento B92, 27(1986); B92, 106(1986); Phys. Rev. A34 4737 (1986); Nuovo Cimento B98, 1(1987); J. Math. Phys. 28, 598 (1987)
- [52] T. Boudjedaa et al, Physica Scripta 46, 289 (1992); Nuovo Cimento B109, 209 (1994), Physica Scripta 52, 9(1995); B. Bentag et al., Nuovo Cimento B111, 99 (1996); L. Chetouani et al., Physica A234, 529 (1996); B. Bentag, T. Boudjedaa and L. Chetouani Ann. Phys. 9, 2, 103 (2000).

-
- [53] H. J. Bhabha, *Reviews of Modern Physics*, volume 17, Number 2 and 3, April-July, 1945
- [54] R-K Loide, I Ots and R Saar, *J. Phys. A: Math.Gen.*30(1997)4005-4017
- [55] B. Boutabia-Chéraitia and T. Boudjedaa, *DKP Green Function and Scattering Matrix : Barrier Potential Case*, soumis.
- [56] *Dictionnaire de Physique*, J.P.Mathieu, A. Kastler, P. Fleury, 1985.
- [57] Piers Kennedy, hep-th/0107170 v1